

Universidade Federal de Sergipe
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia
Núcleo de Pós-Graduação em Física

Dissertação de Mestrado

Abordagem Numérica da Teoria Quântica de Circuitos

por

José Jaédson Barros da Silva

São Cristóvão - SE

Julho - 2015

JOSÉ JAÉDSON BARROS DA SILVA

ABORDAGEM NUMÉRICA DA TEORIA QUÂNTICA DE CIRCUITOS

Dissertação apresentada ao Núcleo de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Assis Gois de Almeida.

São Cristóvão - SE

Julho - 2015

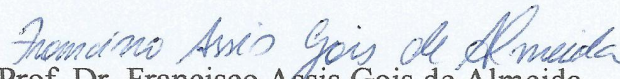
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
Núcleo de Pós-Graduação em Física

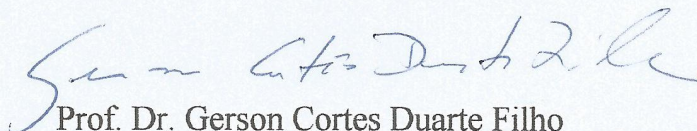
*Abordagem numérica da teoria quântica de
circuitos*

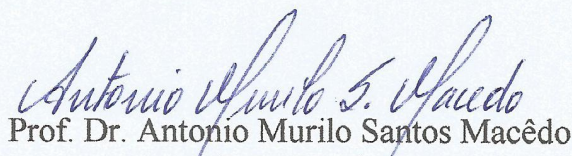
por

José Jaédson Barros da Silva

Dissertação de mestrado **APROVADA** em sessão pública no dia trinta de julho do ano dois mil e quinze perante a banca examinadora constituída pelos seguintes professores:


Prof. Dr. Francisco Assis Gois de Almeida
(DFI-UFS)


Prof. Dr. Gerson Cortes Duarte Filho
(DFI-UFS)


Prof. Dr. Antonio Murilo Santos Macêdo
(DF-UFPE)

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao professor **Francisco Assis**, meu orientador, por contribuir bastante para minha formação desde as disciplinas de graduação e pós-graduação até a orientação no mestrado onde durante todo esse tempo sempre se dedicou ao máximo para passar seus conhecimentos e por isto me sinto muito honrado em ter sido orientado por um profissional com tamanha competência. Sou grato ao professor **Gerson Cortês** que também contribuiu de forma muito significativa para minha formação desde as disciplinas na graduação. Quero agradecer também de forma especial aos meus pais **Antônio** e **Valdice** por me incentivarem e me apoiarem durante todo o tempo desde a minha vinda à UFS para cursar a graduação. Agradeço também ao meu irmão **Joéliton** e aos meus amigos de residência **Jailsson** e **Jaelsson**. Aos meus colegas de mestrado **Eduardo**, **Francisco**, **Elenilda** e **Erilaine**. De modo geral agradeço a todos os professores e técnicos do DFI e a todos os meus amigos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho. Por fim agradeço à **CAPES** pelo apoio financeiro.

Resumo

Um dos dispositivos mais importantes em física mesoscópica é o ponto quântico. Este dispositivo consiste de uma cavidade de dimensões submicrométricas formada no plano da interface de um gás de elétrons bidimensional (2DEG) em heteroestruturas semicondutoras, em que é possível estudar as propriedades de transporte eletrônico acoplando o ponto quântico a dois reservatórios e estabelecendo-se uma corrente elétrica no sistema. Nesta dissertação estudamos a teoria quântica de circuitos por meio de métodos numéricos com o objetivo de calcular os observáveis de transporte, como a condutância e a potência do ruído de disparo, em um único ponto quântico e em dois pontos quânticos acoplados em série. Em um ponto quântico foi implementado o método numérico da bisseção em Fortran para encontrar a pseudocorrente e, através desta, calcular a condutância e a potência do ruído de disparo em um ponto quântico simétrico e também em um ponto quântico assimétrico. No caso de um ponto simétrico foram comparados os resultados numéricos, obtidos pelo método da bisseção, com os resultados analíticos encontrados na literatura e foi mostrado que há uma perfeita concordância. Também implementamos o método de Newton para dois pontos quânticos associados em série e calculamos a condutância e a potência do ruído de disparo. Os resultados numéricos obtidos pelo método de Newton para dois pontos quânticos simétricos em série também foram comparados com os resultados analíticos encontrados na literatura e mostraram ótima concordância.

Palavras-chave: Física mesoscópica, teoria quântica de circuitos, abordagem numérica.

Abstract

One of the devices most important in mesoscopic physics is the quantum dot. This device consists of a cavity of submicrometric dimensions formed in the interface plane of a electron gas two-dimensional (2DEG) in a semiconductor heterostructure, wherein is possible to study the properties of electronic transport coupling to the two reservoirs and establishing an electric current in the system. In this dissertation we studied the quantum theory of circuits by means of numerical methods with the goal to calculate the observables of transport, such as the conductance and the shot-noise power in a single quantum dot and in two quantum dots coupled in series. In a quantum dot was implemented the numerical method of bisection in Fortran to find the pseudocurrent and, through this, to calculate the conductance and the shot-noise power in a symmetric quantum dot and also in an asymmetric quantum dot. In the case of a symmetric dot were compared the numerical results obtained by bisection method with the analytical results found in the literature and was shown that there is a perfect agreement. We also implemented Newton's method for two quantum dots associated in series and we calculate the conductance and the shot-noise power. The numerical results obtained by the Newton's method, for two symmetric quantum dots in series, were also compared with the analytical results found in the literature and showed excellent agreement.

Keywords: Mesoscopic physics, Quantum theory of circuits, Numerical approach.

Lista de Figuras

1.1	Escala de comprimentos característicos para os diferentes regimes de transporte mesoscópico em baixas temperaturas. Figura baseada na ref. [5].	7
1.2	Representação de um guia de ondas com seção transversal variável e uma restrição de largura a_{min} formada no meio do guia. Figura adaptada da ref. [6]. . .	8
1.3	Energia E fixa comparada à energia $E_n(x)$ dependente do canal. Nesta ilustração, visualmente temos a energia E maior que a energia máxima da barreira em apenas três canais e todas as outras barreiras têm energia máxima maior que E . Figura retirada da ref. [6].	9
1.4	Ilustração do experimento usado para obter a quantização da condutância. Os blocos nos lados esquerdo e direito correspondem aos reservatórios e os semicírculos superior e inferior representam os eletrodos. Figura baseada na ref. [1].	11
1.5	Condutância em função da voltagem repulsiva aplicada aos eletrodos. A quantização de G é dada em múltiplos de $e^2/\pi\hbar$ que é chamado de quantum de condutância. Figura retirada da ref. [3].	12
1.6	Ponto quântico real mostrado na direita e esquematicamente na esquerda. Os elétrons são confinados verticalmente na interface da heteroestrutura de GaAs-AlGaAs formando um gás de elétrons bidimensional (área escura). O confinamento lateral é feito aplicando-se uma voltagem negativa. O ponto quântico é acoplado a dois contatos por dois guias. Figura retirada da ref. [9].	13
1.7	Condutor de comprimento L e seção transversal W entre dois contatos mantidos a potenciais químicos μ_1 e μ_2 . A diferença de potencial aplicada ao condutor é $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$. Figura baseada na ref. [1].	14
1.8	Condutor com probabilidade de transmissão Γ conectado a dois contatos por dois guias. Os potenciais químicos dos contatos são μ_1 e μ_2 de forma que há uma diferença de potencial, $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$, aplicada ao condutor. Figura baseada na ref. [1].	15
1.9	A corrente em função do tempo sofre flutuações em torno do seu valor médio. Figura baseada na ref. [14].	18

2.1	Esquema de um circuito elétrico separado em elementos finitos (terminais, conectores e nós). As tensões nos terminais são fixas e as tensões nos nós são encontradas através das leis de conservação de Kirchhoff. A partir das tensões nos nós é determinada a corrente no circuito. Figura retirada da ref. [6].	21
2.2	Esquema de um circuito elétrico separado em elementos finitos na teoria quântica de circuitos. A matriz tensão em cada reservatório é fixa e a matriz tensão em cada nó é encontrada através das leis de Kirchhoff quânticas. A partir das matrizes tensão nos nós é determinada a matriz corrente do circuito. Figura retirada da ref. [6].	24
2.3	Ilustração de um conector entre dois reservatórios com fases ϕ_1 e ϕ_2 . Por uma questão de simplicidade a matriz tensão de cada reservatório é escolhida de acordo com a eq. (2.21).	27
3.1	Circuito formado por dois conectores em série entre dois reservatórios com fases 0 e ϕ e um nó entre os conectores com fase θ desconhecida. Na teoria quântica de circuitos o nó representa um ponto quântico e os conectores representam os contatos que ligam o ponto quântico aos reservatórios.	29
3.2	Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ dos conectores para um ponto quântico simétrico ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$). A linha tracejada em vermelho é a curva teórica e a linha tracejada em preto foi plotada com os dados numéricos obtidos pelo método da bisseção.	34
3.3	Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função da transparência Γ dos conectores para um ponto quântico simétrico ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$). A linha pontilhada em vermelho é a curva teórica e a linha pontilhada em preto foi plotada com os dados numéricos obtidos pelo método da bisseção.	35
3.4	Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ_2 para diferentes valores fixos de transparência Γ_1 (ver a legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas através do método da bisseção para um ponto quântico assimétrico.	36
3.5	Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função da transparência Γ_2 para diferentes valores fixos de transparência Γ_1 conforme a legenda no gráfico. A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas através do método da bisseção para um ponto quântico assimétrico.	37
4.1	Representação de um circuito formado por três conectores e dois nós entre dois reservatórios. As fases dos nós, θ_1 e θ_2 , são encontradas a partir das leis de conservação de Kirchhoff.	39

4.2	Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ para dois pontos quânticos simétricos conectados em série ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma_3$). A linha pontilhada em vermelho é a curva teórica e a linha pontilhada em preto foi plotada com os dados numéricos do método de Newton.	45
4.3	Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função da transparência Γ para dois pontos quânticos simétricos conectados em série ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma_3$). A linha pontilhada em vermelho é a curva teórica e a linha pontilhada em preto foi plotada com os dados numéricos obtidos pelo método de Newton.	46
4.4	Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ_3 para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde a diferentes valores fixos de $\Gamma_1 = \Gamma_2$ (ver a legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.	47
4.5	Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função de Γ_3 para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde a diferentes valores fixos de $\Gamma_1 = \Gamma_2$ (ver a legenda do gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.	48
4.6	Condutância em função da transparência Γ ($\Gamma = \Gamma_2 = \Gamma_3$) para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde aos valores fixos de Γ_1 (ver a legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.	49
4.7	Potência do ruído de disparo em função de Γ ($\Gamma = \Gamma_2 = \Gamma_3$) para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde aos valores fixos de Γ_1 (ver legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.	49

Sumário

Agradecimentos	iv
Abstract	vi
Lista de Figuras	3
1 Introdução à Física Mesoscópica	6
1.1 Ponto de Contato Quântico e a Quantização da Condutância	8
1.1.1 Pontos Quânticos	12
1.2 Teoria de Espalhamento de Landauer-Büttiker	14
1.2.1 Fórmula de Landauer	15
1.2.2 Fórmula de Büttiker	16
1.3 Ruído de disparo	17
2 Teoria Quântica de Circuitos	20
2.1 Teoria de Circuito Padrão e as Leis de Kirchhoff	20
2.2 Leis de Conservação Quântica	21
2.3 Aproximação de Elemento Finito na Teoria Quântica de Circuitos	24
2.3.1 Reservatórios e Nós	25
2.3.2 Conectores	26
3 Um Ponto Quântico	29
3.1 Método da Bissecção	30
3.2 Implementação do Método da Bissecção para Um Ponto Quântico	31
4 Dois Pontos Quânticos em Série	39
4.1 Sistemas Não-Lineares	40
4.1.1 Método de Newton Aplicado à Resolução de sistemas Não-Lineares . .	41
4.2 Implementação do Método de Newton para Resolver um Sistema Não-Linear Resultante de Dois Pontos Quânticos em Série	43
5 Conclusões e Perspectivas	50

Referências Bibliográficas

Capítulo 1

Introdução à Física Mesoscópica

Os avanços na área de ciências dos materiais a partir da década de 1980 permitiram a construção de dispositivos eletrônicos de dimensões menores que o comprimento de coerência de fase de elétrons [1]. Tais dispositivos proporcionaram a realização de experimentos que revelaram fenômenos até então não observados em sistemas macroscópicos, como efeitos de interferência [2] e a quantização da condutância [3]. Assim surgiu uma nova área de estudo na física denominada posteriormente de física mesoscópica. O termo mesoscópica é devido ao fato destes fenômenos estarem no limiar entre os efeitos clássicos em materiais macroscópicos e os efeitos quânticos em sistemas microscópicos como átomos e núcleos. Os dispositivos usados para estudar os fenômenos que deram origem à física mesoscópica são heteroestruturas semicondutoras que em baixas temperaturas possuem um livre caminho médio da ordem de alguns micrômetros.

Para compreendermos a transição entre os diferentes regimes de transportes eletrônico em dispositivos mesoscópicos devemos definir algumas escalas de comprimento característico. A seguir apresentamos as principais escalas características em que ocorrem os fenômenos mesoscópicos [4, 5]:

1. Comprimento de onda de Fermi, λ_F :

É o menor comprimento característico e está relacionado à energia de Fermi por $\lambda_F = \hbar/2mE_F$. Este comprimento varia de alguns angströms em metais até centenas de angströms em heteroestruturas semicondutoras. Em baixas temperaturas a energia dos elétrons transportados é aproximadamente a energia de Fermi, de modo que λ_F é o comprimento de onda relevante.

2. Livre caminho médio, L_m :

É a distância média entre dois espalhamentos consecutivos quando o elétron atravessa a amostra. L_m está relacionado com o tempo de relaxação do momento τ_m por $L_m = v_f \tau_m$, onde v_f é a velocidade de Fermi. Este comprimento varia de alguns angströms em metais a alguns micrômetros em heteroestruturas semicondutoras.

3. Comprimento de localização eletrônica, ξ :

Mede a extensão espacial das funções de onda dos elétrons. Nos metais ξ estende-se por toda a amostra, enquanto que nos isolantes decai exponencialmente.

4. Comprimento de coerência de fase, L_ϕ :

É a distância na qual os elétrons se deslocam sem perda de coerência de fase, sendo que L_ϕ aumenta rapidamente com a diminuição da temperatura e é a escala mais importante em que ocorrem os efeitos mesoscópicos.

Geralmente, em amostras a baixas temperaturas, os comprimentos característicos obedecem à ordem: $\lambda_F < L_m < \xi < L_\phi$. Considerando uma amostra de tamanho L , há três regimes de transporte mesoscópico (ver fig. 1.1):

1. Regime balístico:

É o regime no qual a dimensão L da amostra é menor que o comprimento de relaxação do momento, isto é, $L < L_m$. Neste regime os elétrons atravessam a amostra sem sofrer espalhamento elástico com outros elétrons ou com impurezas.

2. Regime difusivo:

Ocorre quando $L_m < L < \xi$. Neste caso o elétron é espalhado várias vezes ao atravessar a amostra e o comprimento de relaxação de fase é dado por $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$, onde D é a constante de difusão e τ_ϕ é o tempo de relaxação de fase.

3. Regime localizado:

Quando a dimensão L é tal que $\xi < L < L_\phi$, o transporte está no regime localizado para o qual as funções de onda dos elétrons estão localizadas e a amostra comporta-se como um isolante.

Sistemas com dimensões maiores que o comprimento de coerência de fase ($L > L_\phi$) possuem comportamento ôhmico e podem ser tratados classicamente.

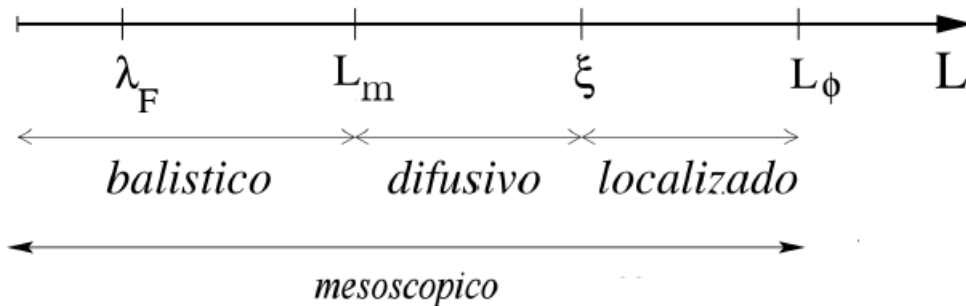


Figura 1.1: Escala de comprimentos característicos para os diferentes regimes de transporte mesoscópico em baixas temperaturas. Figura baseada na ref. [5].

A seguir, na seção (1.1), vamos tratar de alguns sistemas mesoscópicos importantes como o ponto de contato quântico e o ponto quântico.

1.1 Ponto de Contato Quântico e a Quantização da Condutância

Discutiremos agora o ponto de contato quântico (PCQ) que é o sistema mesoscópico mais simples. O PCQ consiste de uma constrição de abertura de tamanho W dividindo duas regiões condutoras onde o transporte é praticamente balístico. Apesar do PCQ não ter qualquer semelhança com um guia de ondas infinitamente longo, a física do transporte quântico é muito similar. Com base nas refs. [6, 7] vamos modelar o PCQ por um guia de ondas de seção transversal variável, onde o guia é estendido ao longo do eixo x , delimitado por paredes impenetráveis, com uma seção transversal retangular ($|y| < a(x)/2$, $|z| < b(x)/2$) variando ao longo do contato. Quando $x \rightarrow \pm\infty$ as dimensões $a(x)$ e $b(x)$ tornam-se constantes a_∞ e b_∞ , respectivamente. No meio do guia as paredes estreitam-se formando uma constrição com largura a_{min} (ver fig. 1.2). Assumiremos também que o guia de ondas é adiabático, ou seja, as

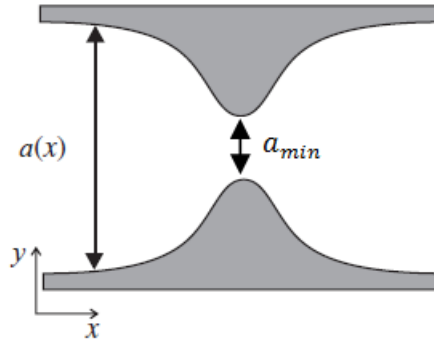


Figura 1.2: Representação de um guia de ondas com seção transversal variável e uma constrição de largura a_{min} formada no meio do guia. Figura adaptada da ref. [6].

dimensões $a(x)$ e $b(x)$ mudam suavemente de tal maneira que a variação é bem menor que a escala de comprimento do contato. Isto é,

$$|a'(x)|, |b'(x)| \ll 1, a(x)|a''(x)|, b(x)|b''(x)| \ll 1$$

onde $a'(x)$ e $a''(x)$ são a primeira derivada e a segunda derivada de $a(x)$ em relação a x , respectivamente, e de modo analogo $b'(x)$ e $b''(x)$ são a primeira derivada e a segunda derivada de $b(x)$ em relação a x , respectivamente. Dessa forma, as paredes são localmente planas e paralelas e as funções de onda do guia não ideal podem ser localmente aproximadas pelas funções de onda de

um guia ideal. Logo, as variáveis na equação de Schrödinger podem ser localmente separadas da seguinte forma:

$$\psi_n(x, y, z) = \psi(x)\Phi_n(a(x), b(x), y, z)$$

onde as funções de onda transversais Φ_n são dadas por

$$\Phi_n(a(x), b(x), y, z) = \frac{2}{\sqrt{a(x)b(x)}} \sin[k_y^n(y - a(x)/2)] \sin[k_z^n(z - b(x)/2)]$$

e assim o movimento transversal do elétron é quantizado nas direções y e z . Isto é, o elétron em um estado n (estes estados são chamados modos em teoria de ondas e canais de transporte em nanociência) tem somente um grau de liberdade correspondente ao movimento unidimensional. A função de onda $\psi(x)$ satisfaz a equação de Schrödinger para o movimento unidimensional

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_n \right) \psi(x) = E_n \psi(x),$$

com a diferença que o potencial é representado pela energia E_n dependente do canal. Esta energia depende das dimensões $a(x)$ e $b(x)$ do guia de ondas da seguinte forma:

$$E_n(x) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_y^2}{a^2(x)} + \frac{n_z^2}{b^2(x)} \right)$$

onde $n_x = k_x a(x)/\pi$ e $n_y = k_y a(x)/\pi$. Este termo equivale à energia para o caso unidimen-

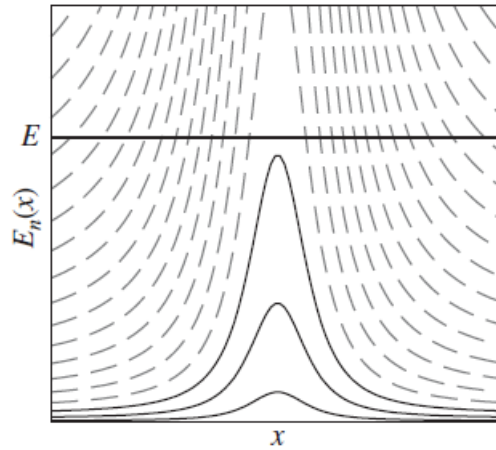


Figura 1.3: Energia E fixa comparada à energia $E_n(x)$ dependente do canal. Nesta ilustração, visualmente temos a energia E maior que a energia máxima da barreira em apenas três canais e todas as outras barreiras têm energia máxima maior que E . Figura retirada da ref. [6].

sional com $E_n(x)$ dependendo do índice do canal $n \equiv (n_y, n_z)$. Para cada canal é formada uma barreira de potencial na parte mais estreita da constrição e à medida que os índices n_y e n_z aumentam, a altura da barreira torna-se maior.

Vamos fixar uma energia E e comparar esta energia, em um determinado canal, com a

altura máxima da barreira considerando que a barreira é impenetrável (ver fig. 1.3). Se E é maior que a altura da barreira os elétrons atravessam a constrição, caso contrário são refletidos. Como a barreira aumenta com o índice do canal, o número de canais abertos em que os elétrons podem passar a constrição é finito e todos os demais são fechados. Em cada canal é definido um coeficiente de transmissão $\Gamma_n(E)$, além disso consideramos barreiras de potencial clássicas, isto é, para canais fechados temos $\Gamma = 0$ e para canais abertos $\Gamma = 1$.

Para determinar a corrente elétrica na constrição vamos partir da seguinte equação da densidade de corrente:

$$j = 2se \int \frac{d^3k}{2\pi^3} \nu(k) f(k). \quad (1.1)$$

Devemos adaptar (1.1) para o caso de movimento transversal quantizado substituindo a integral sobre k_y e k_z pelo somatório sobre os valores discretos k_y e k_z :

$$\int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \frac{dk_z}{2\pi} (\dots) \longrightarrow \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{1}{ab} \sum_n (\dots). \quad (1.2)$$

Pela lei de conservação de cargas, a corrente que flui através de qualquer seção transversal é a mesma e assim podemos escolher uma seção transversal arbitrária para obter a corrente total. Para facilitar os cálculos optamos pela seção transversal com área $a_\infty \cdot b_\infty$, na qual o guia de ondas torna-se ideal. Multiplicando j_x pela área da seção transversal $a_\infty \cdot b_\infty$ encontramos a corrente total na direção x dada por

$$I = 2se \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \nu(k_x) f(k_x) \quad (1.3)$$

onde $\nu(k_x) = \hbar k_x / m$ é a velocidade e $f_n(k_x)$ é o fator de preenchimento de Fermi

$$f_n(k_x) = f_F(E(k) - \mu) = \frac{1}{1 + e^{(E - \mu)/k_B T}}. \quad (1.4)$$

Para canais fechados ($\Gamma = 0$) todos elétrons vindos da esquerda são refletidos pela barreira, ocorrendo o mesmo para elétrons vindos da direita. Dessa forma, em um canal fechado os fatores de preenchimento são os mesmos em ambas as direções de momentos, $f_n(k_x) = f_n(-k_x)$, e como as velocidades são opostas a contribuição dos canais fechados para a corrente é nula.

Já para canais abertos, os fatores de preenchimento nas duas direções de momentos são diferentes e para entender como os elétrons chegam ao guia de ondas devemos considerar o conceito de reservatório. Um reservatório é um elemento macroscópico contendo um grande número de elétrons em equilíbrio térmico, em que os elétrons são caracterizados pelo fator de preenchimento de Fermi que depende da energia e do potencial químico. No nosso caso o guia de ondas está conectado a dois destes reservatórios, esquerdo quando $x \rightarrow -\infty$ e direito quando $x \rightarrow +\infty$. Os elétrons que vêm do reservatório esquerdo têm fator de preenchimento $f_L(E) = f_F(E - \mu_L)$ e os elétrons que vêm do reservatório direito têm fator de preenchimento

$f_R(E) = f_F(E - \mu_R)$. Fazendo a mudança de variável $k_x \rightarrow E$, como $\nu(k_x) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x}$, devemos substituir $\nu(k_x)dk_x = dE/\hbar$ em (1.3) para obter a equação

$$I = \frac{2se}{2\pi\hbar} \sum_{n:\text{aberto}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE [f_L(E) - f_R(E)]. \quad (1.5)$$

Integrando (1.5) na energia à temperatura nula, temos

$$I = \frac{2se}{2\pi\hbar} N_{\text{abertos}} (\mu_L - \mu_R)$$

$$I = G_Q N_{\text{abertos}} V \quad (1.6)$$

onde $G_Q = \frac{2se^2}{2\pi\hbar}$ é o quantum de condutância e $V = (\mu_L - \mu_R)/e$ é a diferença de potencial aplicada. Portanto, de (1.6) concluímos que a condutância do ponto de contato é quantizada em múltiplos de G_Q . Este fator depende apenas da carga elementar e da constante de Planck que são constantes fundamentais. Logo G_Q não depende da geometria, do tamanho da nanoestrutura ou das propriedades do material.

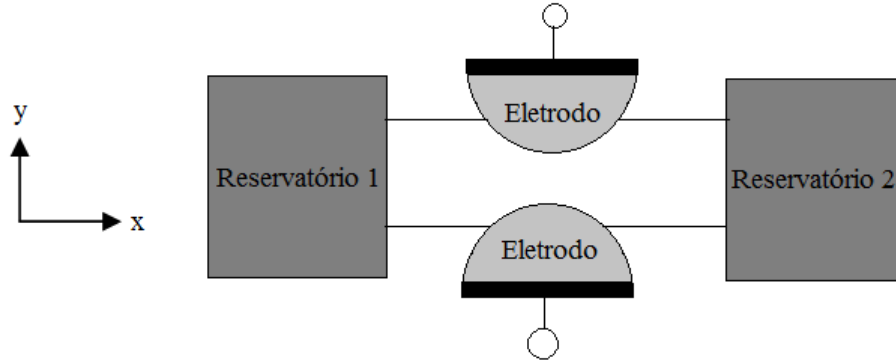


Figura 1.4: Ilustração do experimento usado para obter a quantização da condutância. Os blocos nos lados esquerdo e direito correspondem aos reservatórios e os semicírculos superior e inferior representam os eletrodos. Figura baseada na ref. [1].

Experimentalmente, a quantização da condutância foi observada pela primeira vez em heteroestruturas semicondutoras de GaAlAs-GaAs nas quais os elétrons são confinados numa superfície formando um gás de elétrons bidimensional [3]. Nestas condições o guia de ondas do qual tratamos tem dimensão $b \rightarrow 0$ e a única dimensão transversal relevante é a dimensão a . Para confinar os elétrons bidimensionalmente são colocados dois eletrodos nas bordas da nanoestrutura e aplicado um potencial repulsivo criando paredes impenetráveis, de tal maneira que é formada uma constrição entre os eletrodos (ver fig. 1.4). Quando a voltagem repulsiva é aumentada, a largura da constrição a_{\min} diminui. Dessa forma a_{\min} é controlada pela diferença

de potencial aplicada aos eletrodos. Conforme a largura da constrição aumenta, mais canais de propagação são abertos, ou seja, um novo canal com índice $n = (n_y, 1)$ abre-se quando a energia máxima da barreira W_n torna-se maior do que a energia de Fermi:

$$W_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a_{min}^2} n_y^2 = E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (1.7)$$

o que implica em um número de canais abertos dado por

$$N_{abertos} = \text{inteiro}\left(\frac{a_{min} k_F}{\pi}\right). \quad (1.8)$$

Logo, variando-se a voltagem repulsiva muda-se o número de canais abertos e é esperado que a dependência da condutância com esta voltagem seja em forma de degraus com múltiplos de G_Q . Isto foi observado nos experimentos de Wees [3] e Wharam [8] conforme mostrado na figura (1.5).

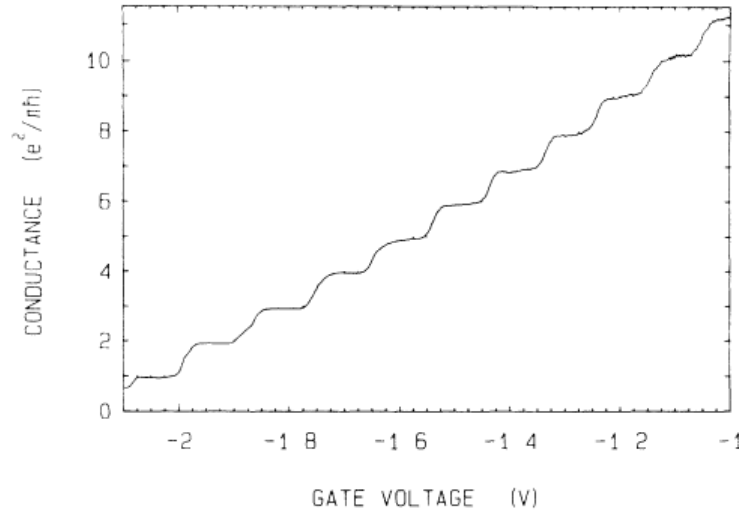


Figura 1.5: Condutância em função da voltagem repulsiva aplicada aos eletrodos. A quantização de G é dada em múltiplos de $e^2/\pi\hbar$ que é chamado de quantum de condutância. Figura retirada da ref. [3].

1.1.1 Pontos Quânticos

Um ponto quântico é uma cavidade formada em um gás de elétrons bidimensional (2DEG), na região da interface de uma heteroestrutura semicondutora, aplicando-se um potencial para confinar os elétrons em uma pequena região no plano da interface (ver fig. 1.6). O tamanho de um ponto quântico é da ordem de $1\mu m$, que é bem menor que o comprimento de coerência de fase. Isto garante que o transporte através deste dispositivo é coerente, ou seja, a fase dos elétrons é preservada e assim surgem novos fenômenos não observados em condutores macroscópicos. Pontos quânticos pertencem à classe de sistemas mesoscópicos que está

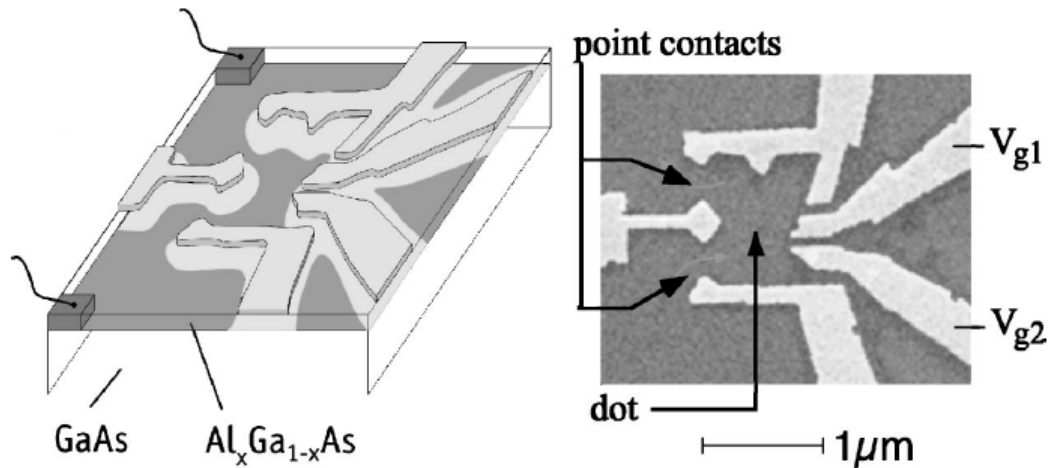


Figura 1.6: Ponto quântico real mostrado na direita e esquematicamente na esquerda. Os elétrons são confinados verticalmente na interface da heteroestrutura de GaAs-AlGaAs formando um gás de elétrons bidimensional (área escura). O confinamento lateral é feito aplicando-se uma voltagem negativa. O ponto quântico é acoplado a dois contatos por dois guias. Figura retirada da ref. [9].

entre sistemas microscópicos como átomos e núcleos e sistemas macroscópicos. Um sistema é classificado como mesoscópico quando seu tamanho é muito menor do que o comprimento de coerência de fase. No final dos anos 1980 foram produzidas microestruturas semicondutoras suficientemente pequenas e livre de impurezas, de modo que o tamanho L do sistema é menor que o livre caminho médio L_m e o transporte nestes dispositivos é praticamente balístico. O transporte em um ponto quântico balístico não é dominado por espalhamento devido a impurezas e depende apenas dos contornos da estrutura [9].

As propriedades de transporte de um ponto quântico podem ser medidas acoplando este dispositivo a guias de ondas e passando uma corrente elétrica através do ponto quântico. O acoplamento entre o ponto quântico e os guias é controlado experimentalmente, de modo que o ponto pode ser aberto ou fechado. Em pontos quânticos abertos o acoplamento é forte e os elétrons atravessam a junção ponto-guia sem sofrer tunelamento. Mas em pontos quânticos fechados são formadas barreiras e a condutância ocorre apenas por tunelamento. Neste último caso a carga do ponto quântico é quantizada e os níveis de energia são discretos. Devido ao espectro de energia discreto, os pontos quânticos fechados são chamados também de "átomos artificiais". As propriedades de transporte destes "átomos artificiais" são bastante similares a experimentos feitos com nanopartículas metálicas livre de impurezas, moléculas de C_{60} depositadas em substrato de ouro e nanotubos de carbono [9].

Nesta seção falamos sobre alguns dispositivos mesoscópicos importantes. Na próxima seção faremos uma abordagem da teoria de espalhamento de Landauer-Büttiker e mostraremos que a condutância de um condutor balístico em geral está relacionada à probabilidade dos elétrons serem transmitidos através deste condutor.

1.2 Teoria de Espalhamento de Landauer-Büttiker

Seja um condutor de comprimento L e área de seção transversal W , o qual está conectado a dois contatos conforme a fig. 1.7. Se o condutor tem dimensões macroscópicas, sabemos que sua condutância é dada pela segunda lei de Ohm

$$G = \frac{\sigma W}{L} \quad (1.9)$$

onde a condutividade σ é uma propriedade do material e não depende das dimensões do condutor.

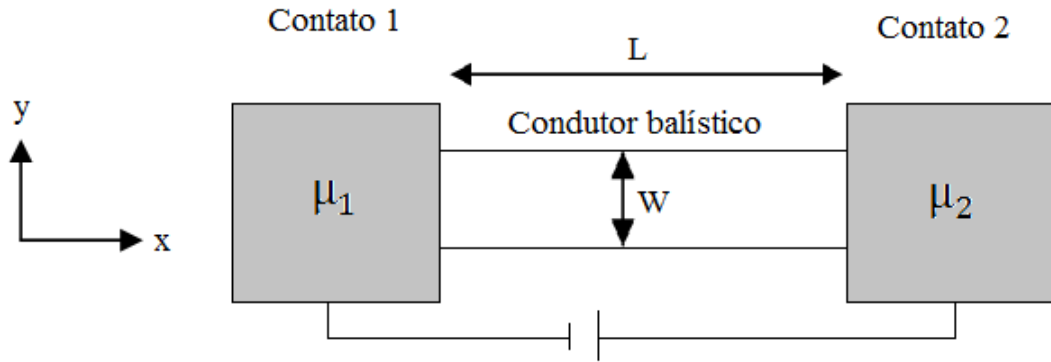


Figura 1.7: Condutor de comprimento L e seção transversal W entre dois contatos mantidos a potenciais químicos μ_1 e μ_2 . A diferença de potencial aplicada ao condutor é $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$. Figura baseada na ref. [1].

Desse modo, se o comprimento do condutor for diminuído a tamanhos cada vez menores é esperado que a condutância aumente indefinidamente. No entanto, isto não é observado experimentalmente. Quando a dimensão L é muito menor do que o livre caminho médio ($L \ll L_m$), a condutância tende a um valor constante G_c . Isto significa que a resistência não é nula mesmo não havendo qualquer espalhamento elástico com outros elétrons ou impurezas. Esta resistência é denominada resistência de contato que é devida à diferença entre o número de modos transversais no condutor e nos contatos [1].

Para calcular a resistência de contato vamos supor que os reservatórios têm potenciais químicos μ_1 e μ_2 de modo que há uma diferença de potencial, $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$, aplicada ao condutor. Assumindo que a temperatura é nula e que o número de modos transversais N é constante sobre o intervalo de energia $\mu_1 < E < \mu_2$, a corrente no condutor resultante de todos os modos transversais é dada por

$$I = \frac{2e^2}{h} N \frac{\mu_1 - \mu_2}{e}. \quad (1.10)$$

De (1.10) a resistência de contato é escrita da seguinte forma:

$$R_c = \frac{(\mu_1 - \mu_2)/e}{I} = \frac{h}{2e^2 N}. \quad (1.11)$$

Nota-se que esta resistência é inversamente proporcional ao número de modos N . Logo, há duas distinções entre a resistência de um condutor ôhmico e de um condutor balístico. Primeiramente, em um condutor balístico há uma resistência de contato que não depende do comprimento L nem da área da seção transversal W . Segundo, esta resistência depende apenas do número de modos transversais N do condutor e diminui em valores discretos à medida que N aumenta [1]. A seguir apresentamos a fórmula de Landauer que engloba estas duas características.

1.2.1 Fórmula de Landauer

Landauer [10, 11], um dos pioneiros no estudo dos fenômenos mesoscópicos, mostrou que a condutância está relacionada à probabilidade dos elétrons serem transmitidos através de um condutor. Seguindo a ref. [1] vamos deduzir a fórmula de Landauer considerando um condutor ligado a dois contatos por dois guias (ver fig. 1.8). Supomos que os guias são condutores

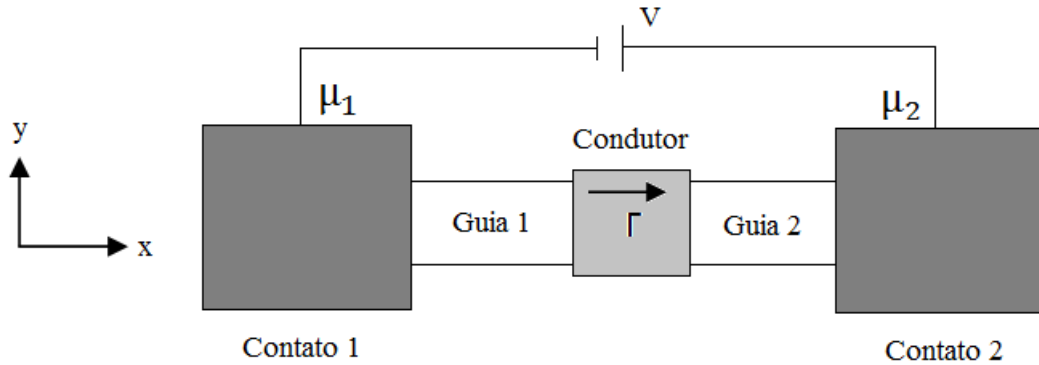


Figura 1.8: Condutor com probabilidade de transmissão Γ conectado a dois contatos por dois guias. Os potenciais químicos dos contatos são μ_1 e μ_2 de forma que há uma diferença de potencial, $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$, aplicada ao condutor. Figura baseada na ref. [1].

balísticos, cada um contendo N modos transversais. O fator Γ é a probabilidade média de um elétron injetado no guia 1 ser transmitido para o guia 2. Consideramos ainda que os contatos são não reflexivos, isto é, os elétrons podem passar dos guias para os contatos sem sofrer qualquer reflexão. Sendo assim, o guia 1 contém apenas os elétrons que ocupam os estados $+k_x$ com potencial químico μ_1 . Analogamente, o guia 2 contém apenas os elétrons que ocupam os estados $-k_x$ com potencial químico μ_2 .

Em temperatura nula, a corrente elétrica ocorre apenas no intervalo de energia entre μ_1

e μ_2 e o fluxo de elétrons que sai do contato 1 para o guia 1 é dado por (ver eq. 1.10):

$$I_1^+ = \frac{2e}{h} N(\mu_1 - \mu_2). \quad (1.12)$$

Para encontrar o fluxo de elétrons que sai do guia 1 para o guia 2, multiplica-se (1.12) pela probabilidade de transmissão Γ :

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} N\Gamma(\mu_1 - \mu_2). \quad (1.13)$$

Há também o fluxo que é refletido a partir do condutor para o guia 1, que é dado por:

$$I_1^- = \frac{2e}{h} N(1 - \Gamma)(\mu_1 - \mu_2). \quad (1.14)$$

Logo, a corrente total em qualquer ponto no dispositivo é a diferença entre a corrente no guia 1 vinda do contato 1 e a corrente refletida de volta pelo condutor para o guia 1. Esta diferença é igual à corrente transmitida para o guia 2:

$$I_{\text{total}} = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \frac{2e}{h} N\Gamma(\mu_1 - \mu_2). \quad (1.15)$$

Portanto, da eq. (1.15) a condutância é escrita da seguinte forma:

$$G = \frac{I_{\text{total}}}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} N\Gamma. \quad (1.16)$$

A eq. (1.16) é conhecida como a fórmula de Landauer. Podemos observar que se a probabilidade de transmissão é igual a 1, a condutância para um condutor balístico é recuperada.

A fórmula de Landauer também pode ser escrita em termos dos autovalores de transmissão do produto matricial tt^\dagger

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(tt^\dagger) = G_Q \sum_{p=1}^N \Gamma_p \quad (1.17)$$

onde $G_Q = \frac{2e^2}{h}$ é o quantum de condutância e $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_N$ são os autovalores de transmissão de tt^\dagger , onde t é a matriz de transmissão obtida via **matriz de espalhamento**¹.

1.2.2 Fórmula de Büttiker

O formalismo de Landauer desenvolvido para o caso de dois terminais foi generalizado por Büttiker para vários terminais. Büttiker [12, 13] observou que em um sistema com vários terminais não há diferença qualitativa entre as medições de tensão e corrente e é possível tratá-

¹Para a dedução da fórmula de Landauer (1.17) via matriz de espalhamento ver ref. [6] p. 30-34.

las simplesmente estendendo a fórmula de resposta linear de dois terminais

$$I = \frac{2e}{h} \bar{\Gamma}(\mu_1 - \mu_2) \quad (1.18)$$

somando sobre todos os terminais (os índices p e q rotulam os terminais)

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q \left[\bar{\Gamma}_{q \leftarrow p} \cdot \mu_p - \bar{\Gamma}_{p \leftarrow q} \cdot \mu_q \right] \quad (1.19)$$

onde a notação $\bar{\Gamma}_{q \leftarrow p}$ rotula os elétrons transferidos do terminal p para o terminal q e a notação $\bar{\Gamma}_{p \leftarrow q}$ os elétrons transferidos do terminal q para o terminal p (geralmente escrevemos os subscritos sem as setas). Substituindo $V = (\mu/e)$ na eq. (1.19), podemos reescrevê-la da seguinte forma:

$$I_p = \sum_q \left[G_{qp} V_p - G_{pq} V_q \right]. \quad (1.20)$$

onde $G_{pq} = (2e^2/h) \bar{\Gamma}_{p \leftarrow q}$ e $G_{qp} = (2e^2/h) \bar{\Gamma}_{q \leftarrow p}$. Para garantir que a corrente é nula quando todos os potenciais são iguais, os coeficientes G na eq. (1.20) satisfazem a seguinte regra da soma:

$$\sum_q G_{qp} = \sum_q G_{pq},$$

o que permite reescrever (1.20) como [1]:

$$I_p = \sum_q G_{qp} (V_p - V_q). \quad (1.21)$$

Nesta seção obtivemos a condutância de Landauer para um condutor balístico. A seguir, na seção 1.3, falaremos sobre o ruído de disparo que também trata-se de um observável de transporte importante.

1.3 Ruído de disparo

Aplicando-se uma diferença de potencial constante a um condutor, uma corrente estacionária é estabelecida. No entanto, se analisarmos cuidadosamente esta corrente descobriremos que há flutuações em torno do seu valor médio (ver fig. 1.9). Estas flutuações são chamadas de ruído. Basicamente, há dois tipos de ruído elétrico: o ruído térmico causado pela agitação térmica dos elétrons e o ruído de disparo devido à quantização dos portadores de carga que constituem a corrente elétrica. O ruído térmico é um ruído de equilíbrio ($V = 0$, $T \neq 0$) e está relacionado diretamente à condutância G por

$$P = 4k_B T G \quad (1.22)$$

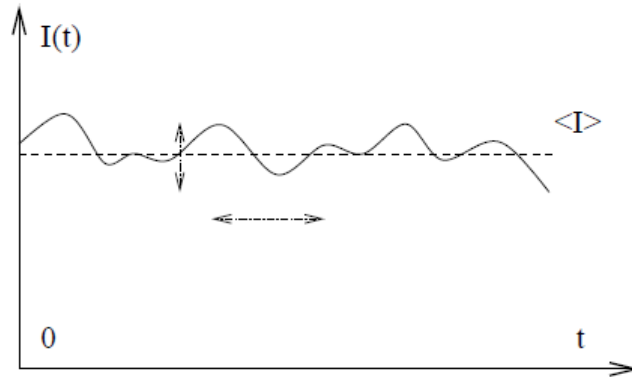


Figura 1.9: A corrente em função do tempo sofre flutuações em torno do seu valor médio. Figura baseada na ref. [14].

onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Portanto, o ruído térmico não dá nenhuma informação nova. Já o ruído de disparo é um ruído de não equilíbrio ($V \neq 0, T = 0$) e é mais interessante porque dá informação da correlação dos elétrons que não está contida na condutância. Em dispositivos nos quais os elétrons transmitidos são descorrelacionados (estatisticamente independentes), esta transferência pode ser descrita pela estatística de poisson. Para este caso o ruído de disparo tem seu valor máximo e é denominado ruído de poisson

$$P_{\text{Poisson}} = 2e\langle I \rangle \quad (1.23)$$

onde $\langle I \rangle$ é a corrente média. A eq. (1.23) é válida somente para baixas frequências, em altas frequências o ruído de disparo se anula [14, 15].

Para dispositivos em que os elétrons estão correlacionados, o ruído de disparo a baixas frequências é suprimido e torna-se menor do que o ruído de poisson. Uma fonte de correlação é o princípio de exclusão de Pauli que proíbe um mesmo estado de ser ocupado por mais de uma partícula. A potência do ruído de disparo neste caso é dada por

$$P = 2e|V|\frac{2e^2}{h}\text{Tr}[tt^\dagger(1 - tt^\dagger)] = 2e|V|\frac{2e^2}{h}\sum_{p=1}^N \Gamma_p(1 - \Gamma_p) \quad (1.24)$$

onde $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_N$ são os autovalores de transmissão do produto matricial tt^\dagger em que t é a matriz de transmissão obtida via **matriz de espalhamento**². Da eq. (1.24) podemos ver que no caso de todos os canais terem transmissão $\Gamma_p = 1$, a contribuição para o ruído é nula. Isto é simples de entender, pois em temperatura zero não há ruído térmico e se a transmissão é total o fluxo de elétrons também será livre de ruído. Mas se Γ_p diminui, o fluxo de elétrons transmitido

²Para a dedução da fórmula da potência do ruído de disparo sub-poissonico via matriz de espalhamento, ver ref. [6].

desvia-se da corrente média resultando em um ruído de disparo diferente de zero, porém, menor que o ruído de poisson por causa da correlação entre os elétrons. Apenas se $\Gamma_p \ll 1$ os elétrons transmitidos são descorrelacionados e o ruído torna-se poissônico [15, 16].

Uma medida do ruído de disparo sub-poissônico é o fator Fano que é a razão entre o ruído de disparo real e o ruído de disparo que seria medido se o sistema produzisse ruído devido somente a elétrons descorrelacionados

$$F = \frac{\sum_p \Gamma_p (1 - \Gamma_p)}{\sum_p \Gamma_p}. \quad (1.25)$$

O fator Fano assume valores entre zero (todos os canais são transparentes) e um (ruído poissônico) [17].

Neste capítulo introduzimos alguns conceitos básicos de física mesoscópica e falamos sobre importantes sistemas mesoscópicos como o ponto de contato quântico e o ponto quântico. Discutimos ainda sobre os observáveis de transporte como a condutância e a potência do ruído de disparo. A seguir, no capítulo 2, vamos apresentar a teoria quântica de circuitos e aplicá-la para obter a condutância e a potência do ruído de disparo em pontos quânticos.

Capítulo 2

Teoria Quântica de Circuitos

Neste capítulo discutiremos a teoria de circuitos aplicada ao estudo do transporte em nanoestruturas. Vamos iniciar com as leis de Kirchhoff e a teoria de circuitos padrão, depois trataremos com mais detalhes a teoria quântica de circuitos propriamente dita.

2.1 Teoria de Circuito Padrão e as Leis de Kirchhoff

Sabemos da eletrodinâmica que para distribuições contínuas de tensão e corrente, ao resolver a equação de Laplace, $\nabla^2\Phi = 0$; $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$, encontramos a corrente das distribuições. O problema é que esta equação é diferencial parcial e nem sempre é fácil resolvê-la, exceto para geometrias simples. No entanto, podemos encontrar sua solução por meio da teoria de circuitos elétricos baseada nas leis de conservação de Kirchhoff. O que fazemos é simplesmente dividir o circuito em elementos finitos e resolvemos equações algébricas para encontrar a corrente [6].

Na teoria de circuitos elétricos, um circuito é constituído basicamente por **terminais**, **conectores** e **nós**, onde as tensões nos terminais são fixas e as tensões nos nós precisam ser determinadas a partir de leis de conservação. Os terminais e nós são conectados por conectores (ver fig 2.1) e a corrente através de cada conector é dada em função da diferença de potencial entre as extremidades do conector multiplicando-se esta diferença de potencial por G_{ik} , em que G_{ik} é a condutância do conector. Ou seja, a corrente é dada pela primeira lei de Ohm:

$$I_{ik} = G_{ik}(V_i - V_k). \quad (2.1)$$

Para encontrar a corrente entre os terminais usamos a lei dos nós de Kirchhoff que afirma que em cada nó, k , a soma das correntes vindas de todos os conectores é igual a zero, ou seja:

$$\sum_k I_{ik} = 0. \quad (2.2)$$

Isto nos dá um sistema de equações para as tensões nos nós, que ao ser resolvido é encontrada a corrente em qualquer conector e entre os terminais. A precisão da solução da equação de

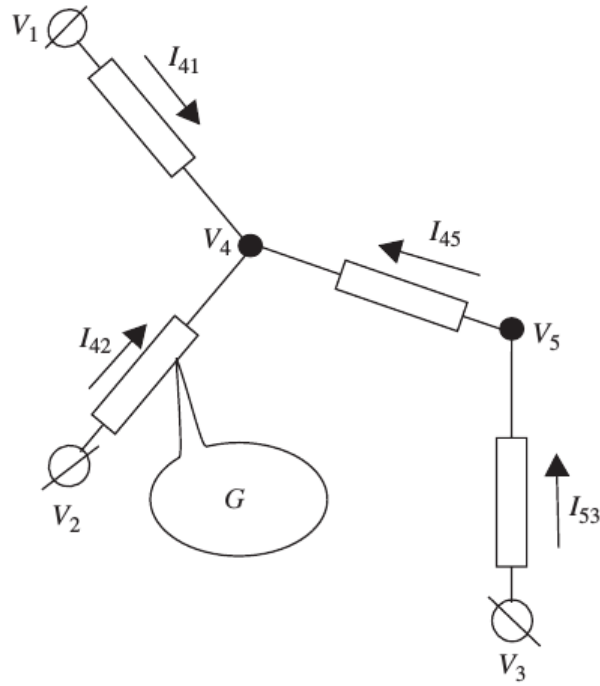


Figura 2.1: Esquema de um circuito elétrico separado em elementos finitos (terminais, conectores e nós). As tensões nos terminais são fixas e as tensões nos nós são encontradas através das leis de conservação de Kirchhoff. A partir das tensões nos nós é determinada a corrente no circuito. Figura retirada da ref. [6].

Laplace aumenta à medida que dividimos o circuito em elementos finitos, até que no limite de um número grande de elementos encontramos a solução com a precisão desejada. Podemos fazer a seguinte analogia: pegamos o volume do condutor e separamos em volumes menores (pequenos cubos), onde os pequenos cubos correspondem os nós. Quanto mais dividimos o volume do condutor em pequenos cubos, mais aumentamos a precisão da solução da equação de Laplace [6].

Nesta seção falamos brevemente da teoria clássica de circuitos. Porém, nosso maior objetivo é tratar regras de teoria quântica de circuitos que, nesta dissertação, será a principal ferramenta de estudo dos fenômenos de transporte em sistemas mesoscópicos. Apesar de análogas ao caso clássico, as propriedades dos elementos finitos na teoria quântica de circuitos são obtidas da mecânica quântica que fornece leis de conservação diferentes da mecânica clássica como veremos na seção 2.2.

2.2 Leis de Conservação Quântica

A mecânica quântica dá origem a leis de conservação que levam em conta a coerência de ondas de elétrons, além disso a corrente adquire estrutura matricial. Seguindo a ref. [6] vamos rever a prova da conservação de corrente de probabilidade na mecânica quântica. Consideremos

uma função de onda $\psi(\mathbf{r})$ que é solução da equação de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

que pode ser reescrita como:

$$-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = [E - U(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Seja, também, o vetor densidade de corrente de probabilidade:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*), \quad (2.4)$$

que fisicamente é definido como a densidade de corrente de partícula. Aplicando o divergente a (2.4), temos:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= -\frac{i\hbar}{2m} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \\ \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= -\frac{i\hbar}{2m} [(\nabla \psi^* \nabla \psi - \nabla \psi \nabla \psi^*) + (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)], \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde o primeiro termo na eq. (2.5) se anula e ficamos com

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar} \left[\psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right) - \psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* \right) \right]. \quad (2.6)$$

Substituindo (2.3) e seu conjugado em (2.6), temos:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar} \left[\psi^* (E - U) \psi - \psi ((E - U) \psi^*) \right] = 0. \quad (2.7)$$

Da eq. (2.7) vemos que para este caso a densidade de corrente é conservada independentemente do potencial. No entanto, consideremos agora duas soluções distintas, $\chi(\mathbf{r})$ e $\psi(\mathbf{r})$, da mesma equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = (E - U(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.8)$$

e

$$-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \chi(\mathbf{r}) = (E' - U(\mathbf{r})) \chi(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

E seja o vetor densidade de corrente de probabilidade:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\chi \nabla \psi - \psi \nabla \chi).$$

De forma análoga ao que foi feito anteriormente para obter a eq. (2.6), encontramos:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar} \left[\chi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right) - \psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \chi \right) \right]. \quad (2.10)$$

Substituindo (2.8) e (2.9) em (2.10), temos:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \frac{i}{\hbar} \left[\chi(E - U)\psi - \psi((E' - U)\chi) \right] \\ \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \frac{i}{\hbar} (E - E')\chi\psi \end{aligned} \quad (2.11)$$

Logo, da eq. (2.11) vemos que neste caso a densidade de corrente não se conserva e não possui análogo clássico. Portanto, a mecânica quântica dá origem a leis de conservação que estão ausentes na mecânica clássica.

Este último caso pode ser entendido se levarmos em conta a presença de spin, onde a função de onda do elétron agora é um spinor com duas componentes, ψ_\uparrow e ψ_\downarrow , que correspondem aos valores de spin $s = \pm \frac{\hbar}{2}$. Assim, em vez do vetor densidade de corrente devemos considerar uma matriz densidade de corrente da seguinte forma [6]:

$$\mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi_\alpha^* \nabla \psi_\beta - \psi_\beta \nabla \psi_\alpha^*), \quad (2.12)$$

onde α e β podem assumir os valores de spin \uparrow e \downarrow .

Outro exemplo é o caso de espalhamento de Andreev [18], em que a função de onda também possui duas componentes, ψ_e e ψ_h , correspondendo a elétrons e buracos respectivamente. Neste caso a matriz densidade de corrente também será dada por [6]:

$$\mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi_\alpha^* \nabla \psi_\beta - \psi_\beta \nabla \psi_\alpha^*), \quad (2.13)$$

onde α e β são os índices de Nambu.

Apesar da matriz corrente nem sempre se conservar, podemos redefini-la adicionando uma matriz corrente de "perda" \check{I}_{CP} de tal maneira que a matriz corrente total será conservada [6]:

$$\check{I}_{\text{total}} = \check{I} + \check{I}_{CP} = 0.$$

Dessa forma podemos usar a conservação da matriz corrente na teoria quântica de circuitos.

Na próxima seção vamos abordar a aproximação de elemento finito na teoria quântica de circuitos e determinar a matriz corrente do circuito a partir da qual é possível calcular importantes observáveis de transporte.

2.3 Aproximação de Elemento Finito na Teoria Quântica de Circuitos

Na teoria quântica de circuitos a aproximação de elemento finito é análoga ao caso clássico – dividimos o circuito em **reservatórios**, **conectores** e **nós** (ver fig.2.2). No entanto, agora caracterizamos os **reservatórios** e **nós** por matrizes tensão \check{G} em vez de usar simplesmente a tensão como na teoria clássica de circuitos. A matriz tensão é fixa nos reservatórios e para resolver o circuito devemos encontrar \check{G} nos nós em função da matriz tensão nos reservatórios. Fazemos isto usando a lei de Kirchhoff quântica, que nos diz que a matriz corrente é conservada em cada nó. Isto é, num nó a soma das matrizes corrente de cada conector é igual a zero [6]:

$$\sum_{\text{conectores}} \check{I} = 0.$$

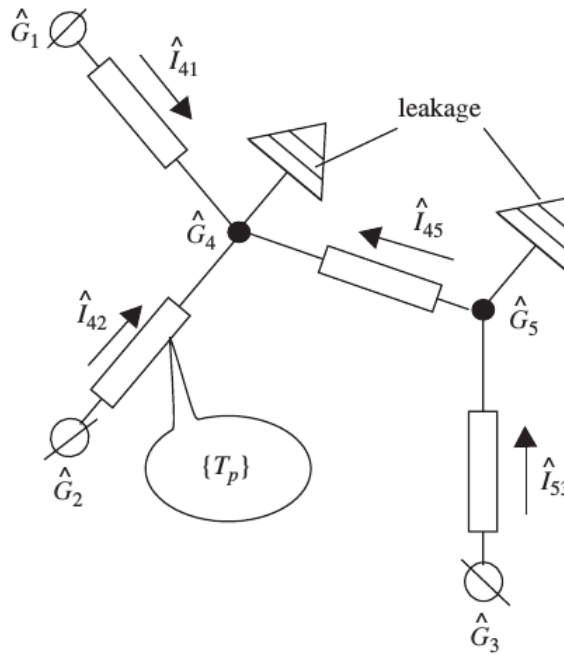


Figura 2.2: Esquema de um circuito elétrico separado em elementos finitos na teoria quântica de circuitos. A matriz tensão em cada reservatório é fixa e a matriz tensão em cada nó é encontrada através das leis de Kirchhoff quânticas. A partir das matrizes tensão nos nós é determinada a matriz corrente do circuito. Figura retirada da ref. [6].

As matrizes tensão dos reservatórios devem sempre ser escolhidas de modo a satisfazer às seguintes propriedades [4]:

$$\check{G}^2 = \check{1} \quad \text{e} \quad \text{Tr}(\check{G}) = 0. \quad (2.14)$$

Devido a $\check{G}^2 = \check{1}$, os autovalores de \check{G} só podem ser ± 1 . Também pelo fato do traço de \check{G} ser nulo o número de autovalores positivos e negativos devem ser iguais, já que o traço é a soma

dos elementos da diagonal da matriz.

Mas como dividir uma nanoestrutura real em elementos finitos para estudá-la usando a teoria quântica de circuitos? Esta divisão é feita de acordo com as propriedades elétricas da nanoestrutura. Se em algum lugar na nanoestrutura existe uma diferença de potencial, por exemplo, este lugar será considerado como um conector. Mas se há um lugar onde a tensão não muda, deverá ser considerado como um nó [6]. Nas subseções (2.3.1) e (2.3.2) discutiremos com mais detalhes cada elemento que compõe um circuito elétrico (reservatórios, nós e conectores).

2.3.1 Reservatórios e Nós

Na aproximação de elemento finito, um reservatório representa uma região com um imenso volume contendo um grande número de estados eletrônicos em equilíbrio local em contato com a nanoestrutura e é caracterizado por uma matriz tensão \check{G} . A matriz tensão é escolhida de acordo com a situação física a ser estudada. Por exemplo, se queremos saber a corrente média na nanoestrutura, a matriz tensão do reservatório será uma matriz 2×2 no espaço de Keldysh:

$$\check{G}_{\text{normal}} = \begin{bmatrix} 1 - 2f(E) & -2f(E) \\ -2 + 2f(E) & 2f(E) - 1 \end{bmatrix}, \quad (2.15)$$

onde $f(E)$ é a função distribuição de Fermi [4, 19].

Se levarmos em consideração o spin, a matriz tensão será uma matriz 4×4 da seguinte forma:

$$\check{G} = \begin{bmatrix} 1 - 2\check{\rho} & -2\check{\rho} \\ -2 + 2\check{\rho} & 2\check{\rho} - 1 \end{bmatrix}, \quad (2.16)$$

onde $\check{\rho}$ é uma matriz 2×2 no índice de spin [4].

Já para reservatórios supercondutores em equilíbrio, a matriz tensão característica é dada por:

$$\check{G}_{\text{sup}} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \check{R} + \check{K} + \check{A} & -\check{R} + \check{K} + \check{A} \\ -\check{R} - \check{K} + \check{A} & \check{R} - \check{K} + \check{A} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

onde \check{R} , \check{K} e \check{A} são matrizes no espaço de Nambu. Em um reservatório supercondutor em equilíbrio, as matrizes \check{R} e \check{A} são escritas da seguinte forma:

$$\check{R} = \frac{1}{\sqrt{(\epsilon + i\delta)^2 - |\Delta|^2}} \begin{bmatrix} \epsilon & \Delta^* \\ -\Delta & -\epsilon \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

$$\check{A} = \frac{-1}{\sqrt{(\epsilon - i\delta)^2 - |\Delta|^2}} \begin{bmatrix} \epsilon & \Delta^* \\ -\Delta & -\epsilon \end{bmatrix}, \quad (2.19)$$

sendo que $\delta \rightarrow +0$, Δ é o potencial de emparelhamento e $\check{K} = \check{R} - \check{A} \tanh(\frac{\epsilon}{2T})$ [4]. Quando temos ambos reservatórios normais e supercondutores, a matriz \check{K} é dada por:

$$\check{K} = \begin{bmatrix} \tanh(\frac{\epsilon+eV}{2T}) & 0 \\ 0 & -\tanh(\frac{\epsilon-eV}{2T}) \end{bmatrix}, \quad (2.20)$$

sendo que $\check{R} = \check{A}$.

Por uma questão de simplicidade é escolhida uma matriz tensão que dá sentido à teoria quântica de circuitos. Consideramos funções de Green matriciais 2×2 cujos valores em dois terminais podem ser parametrizados por um único parâmetro ϕ [6, 20]:

$$\check{G} = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.21)$$

Podemos ver que as condições, $\check{G}^2 = \check{1}$ e $\text{Tr}(\check{G}) = 0$, são satisfeitas para esta matriz tensão \check{G} .

Quanto aos nós, eles são similares aos reservatórios. Isto é, também são caracterizados por matrizes tensão \check{G} . No entanto a matriz tensão de um nó não é fixa, ela deve ser determinada das equações de equilíbrio a partir das leis de conservação de Kirchhoff. A aproximação "nó = reservatório" pode ser feita desde que a condutância seja muito maior do que o quantum de condutância $G \gg G_Q$, caso em que o regime de transporte é semiclássico.

2.3.2 Conectores

Um conector é caracterizado pela corrente que o atravessa, a qual está relacionada aos estados dos nós nas extremidades do conector. No caso clássico, a lei de Ohm descreve esta relação e o único parâmetro necessário é a condutância G do conector. Já no caso quântico, é necessário um conjunto de autovalores de transmissão Γ_p ou uma distribuição de transmissão $\rho(\Gamma)$ para caracterizá-lo. A matriz corrente em um conector em função das matrizes tensão dos nós é dada por:

$$\check{I} = G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p (\check{G}_1 \check{G}_2 - \check{G}_2 \check{G}_1)}{2 + (\Gamma_p/2)(\check{G}_1 \check{G}_2 + \check{G}_2 \check{G}_1 - 2)}. \quad (2.22)$$

Esta equação é muito importante na teoria quântica de circuitos, pois conhecendo a matriz tensão dos **reservatórios** e **nós** podemos determinar por meio de (2.22) a pseudocorrente do conector e através desta última as propriedades de transporte de qualquer nanoestrutura. Consideremos, por exemplo, um conector entre dois reservatórios com fases ϕ_1 e ϕ_2 (ver fig. 2.3). As matrizes tensão das extremidades do conector (ou dos reservatórios) podem ser escolhidas

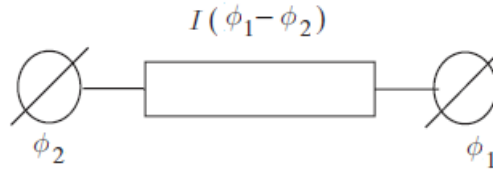


Figura 2.3: Ilustração de um conector entre dois reservatórios com fases ϕ_1 e ϕ_2 . Por uma questão de simplicidade a matriz tensão de cada reservatório é escolhida de acordo com a eq. (2.21).

conforme a eq. (2.21), como segue:

$$\check{G}(\phi_1) = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\phi_1} \\ e^{-i\phi_1} & 0 \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

$$\check{G}(\phi_2) = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\phi_2} \\ e^{-i\phi_2} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.24)$$

Multiplicando (2.23) por (2.24) e (2.24) por (2.23) obtemos, respectivamente:

$$\check{G}_1 \check{G}_2 = \begin{bmatrix} e^{i(\phi_1 - \phi_2)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\phi_1 - \phi_2)} \end{bmatrix}, \quad (2.25)$$

$$\check{G}_2 \check{G}_1 = \begin{bmatrix} e^{-i(\phi_1 - \phi_2)} & 0 \\ 0 & e^{i(\phi_1 - \phi_2)} \end{bmatrix}. \quad (2.26)$$

Tomando a diferença (2.25) - (2.26) e a soma (2.25) + (2.26), temos:

$$\check{G}_1 \check{G}_2 - \check{G}_2 \check{G}_1 = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} 2 \sin(\phi) \quad (2.27)$$

$$\check{G}_1 \check{G}_2 + \check{G}_2 \check{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} 2 \cos(\phi), \quad (2.28)$$

onde $\phi = \phi_1 - \phi_2$.

Usando a relação trigonométrica $\cos(\phi) = 1 - 2 \sin^2(\phi/2)$ na eq. (2.28), obtemos:

$$\check{G}_1 \check{G}_2 + \check{G}_2 \check{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} 2[1 - 2 \sin^2(\phi/2)]. \quad (2.29)$$

Substituindo (2.27) e (2.29) em (2.22) encontramos a expressão para a matriz corrente do sis-

tema considerado na fig. (2.3):

$$\check{I} = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\phi)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2(\phi/2)}. \quad (2.30)$$

Ou simplesmente

$$\check{I} = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} \mathcal{I}(\phi),$$

onde

$$\mathcal{I}(\phi) = G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\phi)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2(\phi/2)}. \quad (2.31)$$

A eq. (2.31) é a pseudocorrente do conector ou a função geratriz de funções simétricas. Podemos observar que $\mathcal{I}(\phi)$ depende apenas da diferença de fase ϕ do conector, o que de certa forma é similar à corrente na teoria de circuito comum que depende apenas da diferença de potencial no conector [6]. Apesar da pseudocorrente (2.31) não se tratar de um observável físico, podemos calcular através dela importantes observáveis de transporte como a condutância G e a potência do ruído de disparo P . Estes observáveis são dados respectivamente por:

$$G = G_Q \sum_p \Gamma_p = \left. \frac{\partial \mathcal{I}(\phi)}{\partial \phi} \right|_{\phi=0}. \quad (2.32)$$

$$P = 2e|V|G_Q \sum_p \Gamma_p(1 - \Gamma_p) = \frac{2e|V|}{3} \left(\left. \frac{\partial \mathcal{I}(\phi)}{\partial \phi} \right|_{\phi=0} - 2 \left. \frac{\partial^3 \mathcal{I}(\phi)}{\partial \phi^3} \right|_{\phi=0} \right). \quad (2.33)$$

Portanto, sabendo a pseudocorrente do conector, calculamos a condutância e a potência do ruído de disparo usando as eqs (2.32) e (2.33).

No capítulo 2 apresentamos a teoria quântica de circuitos (TQC) e a aplicamos para obter a condutância G e a potência do ruído de disparo P em um circuito simples constituído por apenas um conector. A seguir, no capítulo 3, vamos usar a TQC para calcular G e P em um ponto quântico e apresentar os resultados obtidos através do método numérico da bisseção.

Capítulo 3

Um Ponto Quântico

Experimentalmente, para construir um ponto quântico é colocada uma camada de Al-GaAs sobre uma camada de GaAs por epitaxia de feixe molecular de modo que os elétrons acumulam-se na interface de GaAs/AlGaAs formando um gás de elétrons bidimensional e o movimento dos elétrons é confinado em um poço quântico com dimensão 2-D. Aplicando-se um potencial repulsivo a estes elétrons e limitando seu movimento a 1-D é feito o fio quântico. Progredindo com a limitação do movimento dos elétrons a 0-D é formado o ponto quântico que é um dispositivo no qual os elétrons estão confinados nas três direções espaciais.

Na teoria quântica de circuitos (TQC) um ponto quântico é representado por um nó e está conectado a dois reservatórios por dois conectores (ver fig 3.1). Para um único ponto quântico, encontrar a condutância e a potência do ruído de disparo é um problema simples que até pode ser resolvido analiticamente. Porém, se acoplarmos vários pontos quânticos em série a complexidade do problema aumenta bastante tornando-se inviável calcular G e P analiticamente e neste caso o método numérico é uma alternativa. A seguir discutiremos brevemente sobre a TQC aplicada ao ponto quântico e mais adiante, na seção 3.1, apresentaremos o método da bisseção. Por fim, na seção 3.2, vamos implementar o método da bisseção para um ponto quântico e apresentar os resultados numéricos de G e P comparando com os resultados analíticos encontrados na literatura.

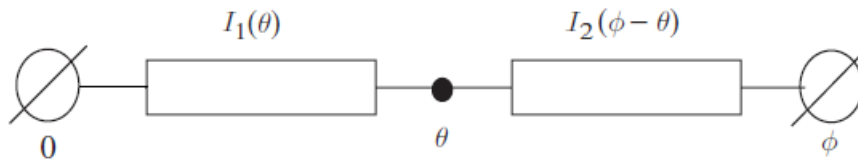


Figura 3.1: Circuito formado por dois conectores em série entre dois reservatórios com fases 0 e ϕ e um nó entre os conectores com fase θ desconhecida. Na teoria quântica de circuitos o nó representa um ponto quântico e os conectores representam os contatos que ligam o ponto quântico aos reservatórios.

Consideremos um circuito formado por dois conectores em série entre dois terminais com fases 0 e ϕ conhecidas e um nó entre os conectores com fase θ a ser determinada (ver fig.

3.1). O objetivo é encontrar a fase do nó e consequentemente a pseudocorrente, $\mathcal{I}(\phi)$, do ponto quântico. Para isto devemos saber a pseudocorrente de cada conector, que neste caso é

$$\mathcal{I}_1(\theta) = G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\theta)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2(\theta/2)} \quad (3.1)$$

para o conector com diferença de fase θ , e

$$\mathcal{I}_2(\phi - \theta) = G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\phi - \theta)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2[(\phi - \theta)/2]} \quad (3.2)$$

para o conector com diferença de fase $(\phi - \theta)$. Depois usamos a lei de Kirchhoff no nó, que fornece

$$\mathcal{I}_1(\theta) - \mathcal{I}_2(\phi - \theta) = 0. \quad (3.3)$$

Substituindo (3.1) e (3.2) em (3.3), temos:

$$G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\theta)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2(\theta/2)} - G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\phi - \theta)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2[(\phi - \theta)/2]} = 0 \quad (3.4)$$

Da eq. (3.4) determinamos a fase, θ , do nó e consequentemente a pseudocorrente, $\mathcal{I}(\phi)$, do ponto quântico que é a mesma para qualquer um dos dois conectores devido à lei dos nós de Kirchhoff [6], isto é,

$$\mathcal{I}(\phi) = \mathcal{I}_1(\theta) = \mathcal{I}_2(\phi - \theta).$$

No entanto, em vez de obter θ e $\mathcal{I}(\phi)$ analiticamente, faremos isto através do método numérico da bisseção. Antes porém, faremos uma breve revisão do método da bisseção na seção (3.1) e na seção (3.2) vamos usá-lo para obter a pseudocorrente do ponto quântico.

3.1 Método da Bisseção

O método da bisseção é um método numérico iterativo que consiste em dividir à metade sucessivas vezes um intervalo de uma função, o qual contém ao menos uma raiz, com o objetivo de encontrar as raízes ou zeros da função neste intervalo.

Seja uma função f contínua definida no intervalo fechado $[a_0, b_0]$ tal que $f(a_0)$ e $f(b_0)$ têm sinais diferentes, ou seja, $f(a_0) \cdot f(b_0) < 0$. O teorema do valor intermediário afirma que existe ao menos um $x_0 \in [a_0, b_0]$ que é raiz de f , de modo que $f(x_0) = 0$. Por simplicidade vamos supor que há apenas uma raiz no intervalo $[a_0, b_0]$. Para encontrar a raiz de f usando o

método da bisseção, dividimos o intervalo $[a_0, b_0]$ no ponto médio

$$m_0 = \frac{a_0 + b_0}{2}$$

e testamos se $f(m_0) = 0$ ou $f(m_0) \neq 0$. Se $f(m_0) = 0$ a raiz foi encontrada na primeira tentativa e é dada por $x_0 = m_0$. Caso contrário, a raiz está no intervalo $[a_0, m_0]$ ou no intervalo $[m_0, b_0]$. Se

$$f(a_0) \cdot f(m_0) < 0$$

a raiz está no intervalo $[a_0, m_0]$ e fazemos $a_1 = a_0$ e $b_1 = m_0$. Mas, se

$$f(m_0) \cdot f(b_0) < 0$$

a raiz está no intervalo $[m_0, b_0]$ e fazemos $a_1 = m_0$ e $b_1 = b_0$. Dessa forma garantimos que a raiz está no novo intervalo $[a_1, b_1]$ que foi reduzido à metade do intervalo $[a_0, b_0]$. Repetimos o procedimento para os sucessivos intervalos $[a_1, b_1], [a_2, b_2], \dots, [a_k, b_k]$ até encontrar a raiz $x_0 = m_k$ com uma precisão ε , de tal maneira que $|f(m_k)| \leq \varepsilon$, [21, 22, 23].

3.2 Implementação do Método da Bisseção para Um Ponto Quântico

Usando a lei de conservação de Kirchhoff para um ponto quântico obtivemos a eq. (3.4). Considerando que o número de canais em cada conector é o mesmo ($N_1 = N_2 = N$) e que as transparências de cada canal em um mesmo conector são iguais, isto é, $\Gamma_p = \Gamma_1$ para o conector 1 e $\Gamma_p = \Gamma_2$ para o conector 2, a eq. (3.4) pode ser escrita da seguinte forma:

$$f(\theta) = \frac{\Gamma_1 \sin(\theta)}{1 - \Gamma_1 \sin^2(\theta/2)} - \frac{\Gamma_2 \sin(\phi - \theta)}{1 - \Gamma_2 \sin^2[(\phi - \theta)/2]}, \quad (3.5)$$

onde Γ_1 e Γ_2 são as transparências dos conectores 1 e 2, respectivamente.

Inicialmente vamos tomar valores fixos de Γ_1 , Γ_2 e ϕ na eq. (3.5) e encontrar, através do método da bisseção, um θ para o qual $f(\theta) = 0$. Substituindo este valor de θ na equação

$$\hat{\mathcal{I}}(\phi) = \frac{\Gamma_2 \sin(\phi - \theta)}{1 - \Gamma_2 \sin^2[(\phi - \theta)/2]} \quad (3.6)$$

determinamos a pseudocorrente adimensional e intensiva do ponto quântico para um único valor de ϕ e para Γ_1 e Γ_2 fixos, onde

$$\hat{\mathcal{I}}(\phi) = \frac{\mathcal{I}(\phi)}{NG_Q}$$

é adimensional por estar dividida por G_Q e intensiva por estar dividida por N . Agora variamos ϕ e encontramos $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$, usando a eq. (3.6), para cada valor de ϕ diferente. Em seguida calculamos

a derivada numérica de $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ em relação a ϕ e fazemos um ajuste quadrático usando os valores de ϕ e $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$, de modo que

$$\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi) = c_3\phi^2 + c_2\phi + c_1 \quad (3.7)$$

onde c_1 , c_2 e c_3 são os coeficientes da equação quadrática ajustada e o ponto em cima de $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ significa uma derivada em relação a ϕ . Da eq. (2.32) vimos que a condutância é dada pela derivada da pseudocorrente em $\phi = 0$. Logo, tomando $\phi = 0$ em (3.7) obtemos a condutância adimensional e intensiva do ponto quântico que será dada pelo coeficiente c_1 :

$$g = \dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi = 0) = c_1. \quad (3.8)$$

Já a potência do ruído de disparo é obtida da eq. (2.33) que envolve a primeira e a terceira derivadas em $\phi = 0$. Então, devemos calcular a partir da eq. (3.7) a terceira derivada $\ddot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi = 0)$ como segue:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi) &= c_3\phi^2 + c_2\phi + c_1 \\ \Rightarrow \ddot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi) &= 2c_3\phi + c_2 \\ \Rightarrow \ddot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi) &= 2c_3 \\ \Rightarrow \ddot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi = 0) &= 2c_3. \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde cada ponto em cima de $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ significa uma derivada. Usando as eqs. (3.8) e (3.9) encontramos a potência do ruído de disparo adimensional e intensiva:

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{3} \left[\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi = 0) - 2\ddot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi = 0) \right] \\ p &= \frac{1}{3}(c_1 - 4c_3). \end{aligned} \quad (3.10)$$

A condutância e a potência do ruído de disparo adimensionais e intensivas, que podem ser obtidas das eq.s (3.8) e (3.10), correspondem a valores de Γ_1 e Γ_2 fixos. Mas, podemos variar Γ_1 e Γ_2 considerando um ponto quântico simétrico ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$) e repetir todo o procedimento para encontrar g e p para cada valor de Γ diferente e depois plotar gráficos de g e de p em função de Γ . Também pode-se manter Γ_1 fixo e variar Γ_2 e da mesma forma plotar gráficos de g e p em função de Γ_2 para pontos quânticos assimétricos.

Apresentamos a seguir o algoritmo do método da bisseção para obter a pseudocorrente adimensional e intensiva de um ponto quântico e a partir de $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ calcular g e p .

1. Leia os dados de entrada.
 - Transparências dos dois conectores Γ_1 e Γ_2 ;
 - Fase do primeiro reservatório 0;
 - Fase do segundo reservatório ϕ ;

- Valor máximo até o qual a fase do segundo reservatório varia ($\phi_{\text{maximo}} \leq 0, 1$);³
- Intervalo de variação da fase do segundo reservatório $\Delta\phi$;
- Número de pontos de variação n_p ;

2. Faça.

- $\phi \leftarrow \Delta\phi$;
- $\theta_1 \leftarrow 0$;
- $\theta_2 \leftarrow \phi$;

3. Agora faça.

- $\theta \leftarrow \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$.

4. Usando a eq. (3.5) obtenha $f(\theta_1)$, $f(\theta_2)$, $f(\theta)$ e $|f(\theta)|$.

5. Teste se $f(\theta_2) \cdot f(\theta) < 0$.

- Em caso afirmativo faça $\theta_1 \leftarrow \theta$ e $\theta_2 \leftarrow \theta_2$;
- Senão faça $\theta_2 \leftarrow \theta$ e $\theta_1 \leftarrow \theta_1$;

6. Volte ao passo 3 e repita os passos 3, 4 e 5 enquanto $|f(\theta)| > 1 \cdot 10^{-17}$.

7. Após encontrar θ para o qual $|f(\theta)| \leq 1 \cdot 10^{-17}$, substitua este valor de θ na eq. (3.6) para obter $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ para um único valor de ϕ .

8. Faça para $j = 1, 2, \dots, n_p - 1$:

- $\phi \leftarrow \phi + j \cdot \Delta\phi$;
- $\theta_1 \leftarrow 0$;
- $\theta_2 \leftarrow \phi$;

9. Ao final do passo 8, para cada j volte ao passo 3 e repita de 3 a 7.

10. Armazene cada valor de ϕ diferente em um vetor $x_d(j)$.

11. Obtenha a derivada $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$. Para isto calcule a diferença entre cada dois valores consecutivos de $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ e divida essa diferença por $\Delta\phi$.

12. Armazene cada valor de $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$ em um vetor $y_d(j)$.

13. Com os dados de ϕ e $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$ armazenados nos vetores $x_d(j)$ e $y_d(j)$, respectivamente, faça um ajuste parabólico e obtenha os coeficientes c_3 , c_2 e c_1 da parábola.

³O critério ($\phi_{\text{maximo}} \leq 0, 1$) é devido ao fato do ajuste quadrático dos dados ser eficiente até o valor de 0,1 para ϕ_{maximo} .

14. Usando as eqs (3.8) e (3.10) e os coeficientes encontrados no passo 13, calcule a condutância e a potência do ruído de disparo adimensionais e intensivas.
15. Faça $\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$ e varie Γ começando de 0,01 até 1 em intervalos de 0,01. Para cada valor de Γ volte ao passo 3 e repita os passos de 3 a 14.
16. Armazene os dados de Γ , g e p em um arquivo com três colunas: uma coluna para Γ , outra para g e outra para p . Com estes dados plote um gráfico de $g \times \Gamma$ e outro gráfico de $p \times \Gamma$.
17. Execute os passos 15 e 16, mas mantendo Γ_1 fixo e fazendo $\Gamma = \Gamma_2$.

O algoritmo acima foi implementado em Fortran e todos os resultados apresentados neste capítulo foram obtidos por meio desta implementação. Na figura (3.2) são apresentados os resultados da condutância adimensional e intensiva encontrados pelo método da bisseção para um ponto quântico simétrico (linha pontilhada em preto). A curva teórica (linha pontilhada em vermelho) foi determinada a partir da seguinte equação:

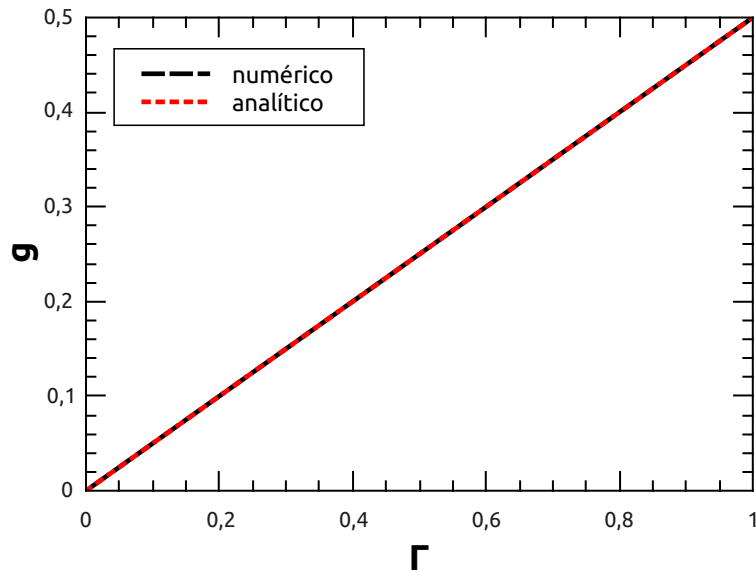


Figura 3.2: Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ dos conectores para um ponto quântico simétrico ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$). A linha tracejada em vermelho é a curva teórica e a linha tracejada em preto foi plotada com os dados numéricos obtidos pelo método da bisseção.

$$g = \frac{\Gamma}{2}. \quad (3.11)$$

A eq. (3.11) foi obtida para o caso particular $L = 1$ da expressão da média da condutância para uma cadeia de L pontos quânticos simétricos [7]:

$$g = \frac{\Gamma}{L + 1}. \quad (3.12)$$

As eqs. (3.11) e (3.12) também podem ser obtidas via lei de Ohm clássica, o que torna o resultado coerente pois estamos no regime semiclássico $N \gg 1$.

Vemos da figura (3.2) que para contatos totalmente fechados (conectores com transparência $\Gamma = 0$) a condutância do ponto quântico é nula, pois neste caso não há corrente elétrica atravessando a cavidade (ponto quântico). Porém, à medida que a probabilidade de transmissão dos contatos aumenta ($\Gamma > 0$) a condutância do ponto quântico também aumenta e no caso de uma cavidade completamente aberta, quando os contatos são ideais com transparência $\Gamma = 1$, a condutância do ponto quântico tem seu valor $g = \frac{1}{2}$ que é a condutância esperada para uma cavidade aberta e simétrica.

São apresentados na figura (3.3) os resultados de $p \times \Gamma$ encontrados através do método da bisseção para um ponto simétrico (linha pontilhada em preto) e o resultado teórico (linha pontilhada em vermelho). Para determinar a curva teórica de $p \times \Gamma$ foi usada a seguinte expressão:

$$p = \frac{\Gamma}{8}(2 - \Gamma). \quad (3.13)$$

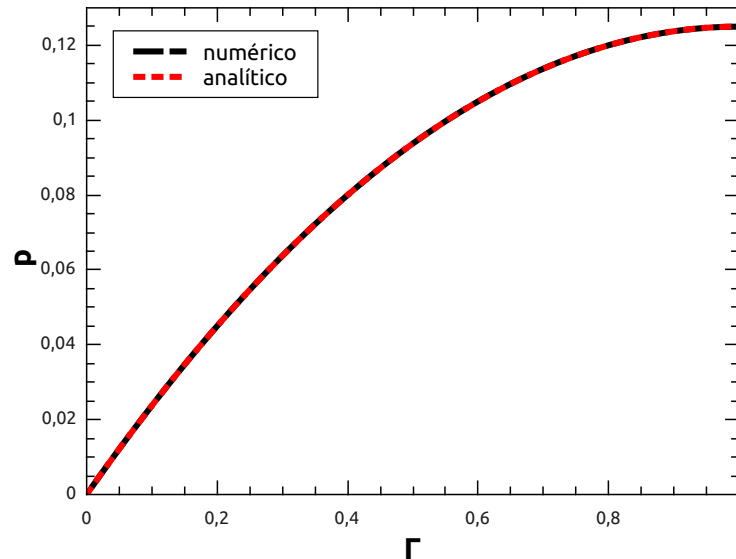


Figura 3.3: Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função da transparência Γ dos conectores para um ponto quântico simétrico ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$). A linha pontilhada em vermelho é a curva teórica e a linha pontilhada em preto foi plotada com os dados numéricos obtidos pelo método da bisseção.

A eq. (3.13) foi obtida da expressão teórica para a média da potência do ruído de disparo de

uma cadeia de L pontos quânticos simétricos tomando-se o caso particular $L = 1$ na seguinte equação [7]:

$$p = \frac{1}{(L+1)^3} \left[\frac{(L+1)^2 + 2}{3} \Gamma - \Gamma^2 \right]. \quad (3.14)$$

Observa-se da figura (3.3) que a potência do ruído de disparo do ponto quântico é zero quando a transparência dos contatos é nula. Isto é simples de entender, pois se a probabilidade de transmissão Γ dos contatos é zero não há corrente elétrica atravessando o ponto quântico e, portanto, não pode haver flutuações de corrente. Mas à medida que a transparência dos contatos aumenta, elétrons são transmitidos através dos contatos e uma corrente elétrica atravessa a cavidade (ponto quântico). Uma vez que a corrente elétrica sofre flutuações ao atravessar a cavidade, a potência do ruído de disparo torna-se então diferente de zero. Quando a cavidade é totalmente aberta (contatos com transparência $\Gamma = 1$) a potência do ruído de disparo é

$$p = 0,125 = \frac{1}{8} = \frac{1}{4} p_{\text{poisson}}$$

que é o valor de p esperado para uma cavidade aberta e simétrica.

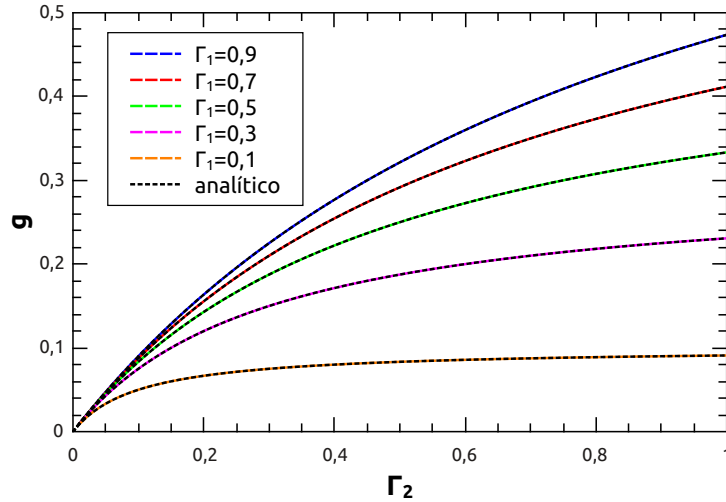


Figura 3.4: Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ_2 para diferentes valores fixos de transparência Γ_1 (ver a legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas através do método da bisseção para um ponto quântico assimétrico.

Discutiremos agora os resultados da condutância e da potência do ruído de disparo adimensionais e intensivas para um ponto quântico assimétrico ($\Gamma_1 \neq \Gamma_2$).

Na figura (3.4) são apresentados os resultados analíticos e numéricos de $g \times \Gamma_2$ para um ponto quântico assimétrico, onde cada curva corresponde a diferentes valores fixos de transparência Γ_1 . A curva teórica foi determinada a partir da condutância ôhmica para dois contatos

em série, que é dada pela seguinte expressão:

$$g = \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2}. \quad (3.15)$$

Nota-se da figura (3.4) que a condutância de uma cavidade assimétrica é suprimida se comparada à condutância de uma cavidade simétrica e quanto maior a assimetria da cavidade, isto é, quanto menor os valores de transparência Γ_1 , maior é a supressão da condutância.

Apresentamos na figura (3.5) os resultados analíticos e numéricos de $p \times \Gamma_2$ para um ponto quântico assimétrico, onde cada curva corresponde a diferentes valores de transparência Γ_1 . A curva analítica foi determinada a partir da seguinte expressão [24]:

$$p = \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2} - \frac{\Gamma_1^4 \Gamma_2^2 + 2\Gamma_1^3 \Gamma_2^2 + 2\Gamma_1^2 \Gamma_2^3 + \Gamma_1^2 \Gamma_2^4}{(\Gamma_1 + \Gamma_2)^4}. \quad (3.16)$$

Para efeito de comparação podemos fazer $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$ em (3.16) e ver que esta equação torna-se igual à expressão (3.13) para o caso particular de uma cavidade simétrica. Vemos da

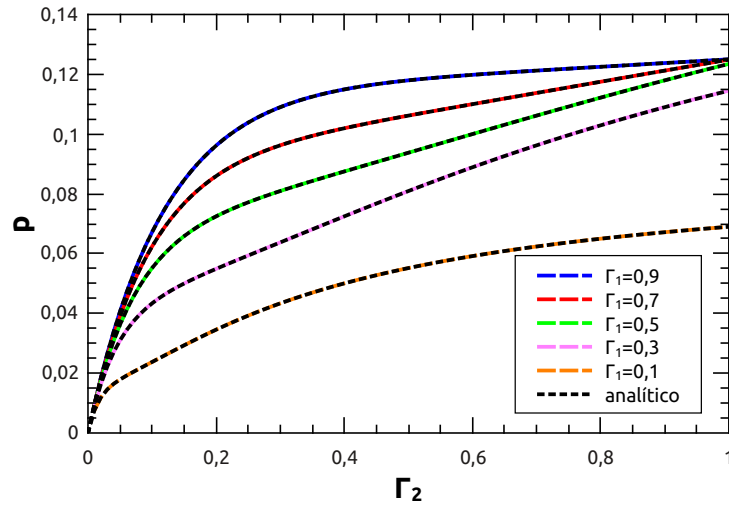


Figura 3.5: Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função da transparência Γ_2 para diferentes valores fixos de transparência Γ_1 conforme a legenda no gráfico. A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas através do método da bisseção para um ponto quântico assimétrico.

figura (3.5) que à medida que a cavidade torna-se mais assimétrica (quando os valores de transparência Γ_1 diminuem) a potência do ruído de disparo é suprimida e no caso de uma cavidade altamente assimétrica ($\Gamma_1 \ll \Gamma_2$) a potência do ruído de disparo se aproxima de zero pois neste caso o sistema pode ser considerado como um único contato com canais completamente abertos ou fechados e, portanto, sem ruído.

Ao observar as figuras (3.2) a (3.5) podemos ver que os resultados numéricos da condutância e da potência do ruído de disparo, tanto em pontos quânticos simétricos quanto em

pontos quânticos assimétricos, estão em plena concordância com seus respectivos resultados analíticos.

A seguir, no capítulo 4, vamos tratar o problema de dois pontos quânticos em série e apresentar os resultados de condutância G e potência do ruído de disparo P . Neste caso em vez do método da bisseção usaremos o método de Newton, pois devemos resolver um sistema não linear e por isto o método de Newton é o mais adequado.

Capítulo 4

Dois Pontos Quânticos em Série

Neste capítulo vamos abordar o problema de dois pontos quânticos conectados em série, isto é, um circuito constituído por três conectores e dois nós entre dois reservatórios (ver fig. 4.1). Os reservatórios têm fases 0 e ϕ conhecidas e os nós têm fases θ_1 e θ_2 que devem ser determinadas a partir das leis de conservação de Kirchhoff.

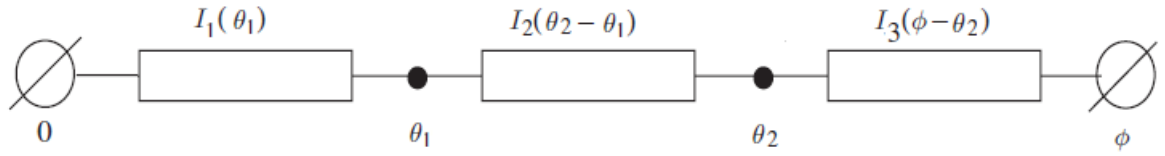


Figura 4.1: Representação de um circuito formado por três conectores e dois nós entre dois reservatórios. As fases dos nós, θ_1 e θ_2 , são encontradas a partir das leis de conservação de Kirchhoff.

A pseudocorrente dos conectores 1, 2 e 3, em função das respectivas diferenças de fase, é dada por:

$$\mathcal{I}_1(\theta_1) = G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\theta_1)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2(\theta_1/2)} \quad (4.1)$$

$$\mathcal{I}_2(\theta_2 - \theta_1) = G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\theta_2 - \theta_1)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2[(\theta_2 - \theta_1)/2]} \quad (4.2)$$

$$\mathcal{I}_3(\phi - \theta_2) = G_Q \sum_p \frac{\Gamma_p \text{sen}(\phi - \theta_2)}{1 - \Gamma_p \text{sen}^2[(\phi - \theta_2)/2]}. \quad (4.3)$$

Usando a lei de conservação de Kirchhoff em cada nó, chegamos ao seguinte sistema não-linear:

$$\begin{cases} \mathcal{I}_1(\theta_1) - \mathcal{I}_2(\theta_2 - \theta_1) &= 0 \\ \mathcal{I}_2(\theta_2 - \theta_1) - \mathcal{I}_3(\phi - \theta_2) &= 0. \end{cases} \quad (4.4)$$

Resolvendo o sistema não-linear em (4.4) encontramos as fases θ_1 e θ_2 e consequentemente determinamos a pseudocorrente, $\mathcal{I}(\phi)$, dos três conectores em série. Devido à lei de conservação

de Kirchhoff, a pseudocorrente $\mathcal{I}(\phi)$ é a mesma para qualquer conector:

$$\mathcal{I}(\phi) = \mathcal{I}_1(\theta_1) = \mathcal{I}_2(\theta_2 - \theta_1) = \mathcal{I}_3(\phi - \theta_2). \quad (4.5)$$

Para obter a solução do sistema não-linear em (4.4) usaremos o método numérico de Newton aplicado à resolução de sistemas não-lineares que será apresentado a seguir na subseção (4.1.1). Antes porém, faremos um breve revisão de sistemas não lineares na seção 4.1.

4.1 Sistemas Não-Lineares

Consideremos uma função não-linear (forma vetorial) $F : D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$, $F = (f_1, \dots, f_n)^T$, em que é usada a seguinte notação [22]:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} \quad e \quad \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

onde a letra T representa uma contração de notação.

Vamos supor que $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ está definida no conjunto $D \subset \mathbf{R}^n$ e tem derivadas contínuas nesse conjunto, além disso existe pelo menos um $\mathbf{x}^* \in D$ tal que $\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = 0$. Devemos encontrar um \mathbf{x} que satisfaça

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0 \quad (4.7)$$

ou equivalentemente

$$\begin{cases} f_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = 0 \\ f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

O vetor gradiente ou o vetor das derivadas parciais da função $f_i(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ é dado por $\nabla f_i(\mathbf{x})$, $i = 1, \dots, n$ [22]:

$$\nabla f_i(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_1}, \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_2}, \dots, \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_n} \right)^T \quad (4.9)$$

onde a letra T em (4.9) representa uma contração de notação.

A matriz jacobiana ou a matriz das derivadas parciais de $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ é dada por $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ [22]:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \nabla f_1(\mathbf{x})^T \\ \nabla f_2(\mathbf{x})^T \\ \vdots \\ \nabla f_n(\mathbf{x})^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_2} & \dots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_n} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_2} & \dots & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_2} & \dots & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_n} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

4.1.1 Método de Newton Aplicado à Resolução de sistemas Não-Lineares

No caso simples de uma função não-linear de apenas uma variável, dado um ponto $(x_k, f(x_k))$, o passo inicial do método de Newton para obter a solução x^* , para a qual $f(x^*) = 0$, é encontrar a reta tangente à curva, $L_k(x)$, no ponto $(x_k, f(x_k))$:

$$L_k(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

onde $L_k(x)$ é chamado modelo local linear.

Fazendo $L_k(x) = 0$ é obtida a nova aproximação $x = x_{k+1}$, a qual é dada por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Repete-se o procedimento para o ponto $(x_{k+1}, f(x_{k+1}))$ e prossegue-se com as iterações até encontrar a solução com uma precisão ε , isto é, $|f(x)| < \varepsilon$.

O modelo local linear apresentado acima também pode ser usado para encontrar a solução de um sistema não-linear. Por exemplo, seja o sistema não-linear considerado na seção (4.1) e uma aproximação conhecida $\mathbf{x}^{(k)} \in D$ para qualquer $\mathbf{x} \in D$. O modelo local linear neste caso é escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{L}_k(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}) + \mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}). \quad (4.11)$$

Fazendo $\mathbf{L}_k(\mathbf{x}) = 0$ encontramos

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}) = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (4.12)$$

Denotando \mathbf{x} por $\mathbf{x}^{(k+1)}$, temos a nova aproximação $\mathbf{x}^{(k+1)}$ dada por

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{s} \quad (4.13)$$

onde \mathbf{s} é a solução do seguinte sistema linear:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{s} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (4.14)$$

Este procedimento é repetido sucessivas vezes até encontrar a solução com determinada precisão ε , ou seja,

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})\|_{\infty} < \varepsilon \quad \text{ou} \quad \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|_{\infty} < \varepsilon \quad (4.15)$$

onde $\|\cdot\|$ representa a norma de um vetor e a notação ∞ significa o valor máximo [22].

Portanto, para encontrar a solução de um sistema não-linear usando o método de Newton devemos proceder em cada iteração da seguinte forma:

1. Calcular $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$;
2. Avaliar a matriz jacobiana no ponto $\mathbf{x}^{(k)}$;
3. Resolver o sistema linear $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{s} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$.

Outra maneira de encontrar a solução de um sistema não-linear é usar o método de Newton modificado que é similar ao método de Newton apresentado acima. Basicamente, a modificação em relação ao método de Newton é que a matriz jacobiana $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(0)})$ é calculada uma única vez no ponto $\mathbf{x}^{(0)}$ e as iterações são feitas da seguinte forma:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{s}^{(k)}$$

onde $\mathbf{s}^{(k)}$ é a solução do sistema linear

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{s}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}).$$

A vantagem do método de Newton modificado é que para resolver o sistema linear só é necessário inverter a matriz jacobiana uma única vez. Por este motivo o método de Newton modificado torna-se interessante, já que a inversão numérica de matrizes requer um alto custo computacional.

Para encontrar a solução do sistema não-linear usando o método de Newton modificado, devemos proceder da seguinte forma:

1. Calcular $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$;
2. Avaliar a matriz jacobiana no ponto $\mathbf{x}^{(0)}$;
3. Resolver o sistema linear $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{s}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$.
4. Proceder com as iterações até encontrar a solução com a precisão desejada.

A seguir, na seção 4.2, vamos implementar o método de Newton para resolver o sistema não-linear para dois pontos quânticos em série e em seguida apresentaremos os resultados numéricos.

4.2 Implementação do Método de Newton para Resolver um Sistema Não-Linear Resultante de Dois Pontos Quânticos em Série

Aplicando a lei de conservação de Kirchhoff em cada nó para o caso de dois pontos quânticos em série, obtivemos o seguinte sistema de equações não-lineares:

$$\mathbf{F}(\theta) = \begin{pmatrix} f_1(\theta) \\ f_2(\theta) \end{pmatrix} = \begin{cases} \frac{\Gamma_1 \sin(\theta_1)}{1 - \Gamma_1 \sin^2(\theta_1/2)} - \frac{\Gamma_2 \sin(\theta_2 - \theta_1)}{1 - \Gamma_2 \sin^2[(\theta_2 - \theta_1)/2]} = 0 \\ \frac{\Gamma_2 \sin(\theta_2 - \theta_1)}{1 - \Gamma_2 \sin^2[(\theta_2 - \theta_1)/2]} - \frac{\Gamma_3 \sin(\phi - \theta_2)}{1 - \Gamma_3 \sin^2[(\phi - \theta_2)/2]} = 0 \end{cases} \quad (4.16)$$

onde Γ_1 , Γ_2 e Γ_3 são as transparências dos conectores 1, 2 e 3 respectivamente. Para chegar à eq. (4.16) consideramos que os canais de um mesmo conector têm transparências iguais e que o número de canais dos três conectores é o mesmo ($N_1 = N_2 = N_3 = N$). De (4.10) e (4.16) a matriz jacobiana é dada por

$$\mathbf{J}(\theta) = \begin{pmatrix} \nabla f_1(\theta)^T \\ \nabla f_2(\theta)^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial f_1(\theta)}{\partial \theta_2} \\ \frac{\partial f_2(\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial f_2(\theta)}{\partial \theta_2} \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

e o modelo local linear é escrito da seguinte forma

$$\mathbf{L}_k(\theta) = \mathbf{F}(\theta^{(k)}) + \mathbf{J}(\theta^{(k)})(\theta - \theta^{(k)}). \quad (4.18)$$

Vamos fixar valores de ϕ e Γ ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma_3$) e resolver o sistema não-linear (4.16) através do método de Newton, isto é, vamos encontrar as soluções θ_1 e θ_2 tal que $\mathbf{F}(\theta) = 0$. Depois usamos a equação

$$\hat{\mathcal{I}}(\phi) = \frac{\Gamma_3 \sin(\phi - \theta_2)}{1 - \Gamma_3 \sin^2[(\phi - \theta_2)/2]} \quad (4.19)$$

e encontramos a pseudocorrente adimensional e intensiva dos dois pontos quânticos para um valor fixo de ϕ , onde a pseudocorrente

$$\hat{\mathcal{I}}(\phi) = \frac{\mathcal{I}(\phi)}{NG_Q}$$

é adimensional por estar dividida por G_Q e intensiva por estar dividida por N . Agora variamos Γ em intervalos de $\Delta\Gamma$ e repetimos o procedimento para cada valor de Γ diferente. Logo após, variamos o valor de ϕ em intervalos de $\Delta\phi$ e repetimos todo o procedimento para cada valor de

ϕ diferente.

Com os dados de ϕ e $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ para um valor fixo de Γ , calculamos a derivada numérica $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$ e fazemos um ajuste quadrático usando os valores de ϕ e $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$ (o ponto em cima de $\hat{\mathcal{I}}(\phi)$ significa uma derivada em relação a ϕ). A partir das eq.s (3.8) e (3.10) obtemos a condutância g e a potência do ruído de disparo p adimensionais e intensivas. Encontramos também g e p para cada valor de Γ diferente e plotamos gráficos de $g \times \Gamma$ e de $p \times \Gamma$.

A seguir apresentamos o algoritmo do método de Newton para resolver o sistema não-linear resultante de dois pontos quânticos em série.

1. Leia os dados de entrada.
 - Transparências dos três conectores Γ_1 , Γ_2 e Γ_3 ;
 - Fase do primeiro reservatório 0;
 - Fase do segundo reservatório ϕ ;
 - Aproximação inicial (chute inicial) θ_1 e θ_2 , ou seja, $\theta^{(k)}$;
 - Intervalo de variação $\Delta\Gamma$;
 - Intervalo de variação $\Delta\phi$;
 - Precisão ε ;
2. Calcule.
 - $\mathbf{F}(\theta^{(k)})$ usando a eq. (4.16);
 - A matriz jacobiana, $\mathbf{J}(\theta^{(k)})$, usando a eq. (4.17);
 - A solução, \mathbf{s} , do sistema linear $\mathbf{J}(\theta^{(k)})\mathbf{s} = -\mathbf{F}(\theta^{(k)})$;
3. Faça.
 - $\theta^{(k)} \leftarrow \theta^{(k)} + \mathbf{s}$.
4. Volte ao passo 2 e repita 2 e 3 enquanto $\|\theta^{(k+1)} - \theta^{(k)}\|_\infty > \varepsilon$.
5. Com θ_1 e θ_2 encontrados, obtenha a pseudocorrente adimensional e intensiva usando a eq. (4.19).
6. Varie Γ começando de 1 até 0,01 em intervalos de $\Delta\Gamma$ e para cada valor de Γ repita os passos de 2 a 5.
7. Varie ϕ em intervalos de $\Delta\phi$ e para cada valor de ϕ repita os passos de 2 a 6.
8. Fixe um valor de Γ com ϕ variando e calcule a derivada numérica $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$.
9. Faça um ajuste quadrático usando os dados de ϕ e $\dot{\hat{\mathcal{I}}}(\phi)$ e obtenha a condutância e a potência do ruído de disparo adimensional e intensiva através das eq.s (3.8) e (3.10).

10. Repita os passos 8 e 9 para cada valor de Γ diferente. Agora construa gráficos de $g \times \Gamma$ e $p \times \Gamma$.

O algoritmo acima foi implementado em Fortran e todos os resultados apresentados a seguir foram obtidos através desta implementação. A figura (4.2) mostra os resultados da con-

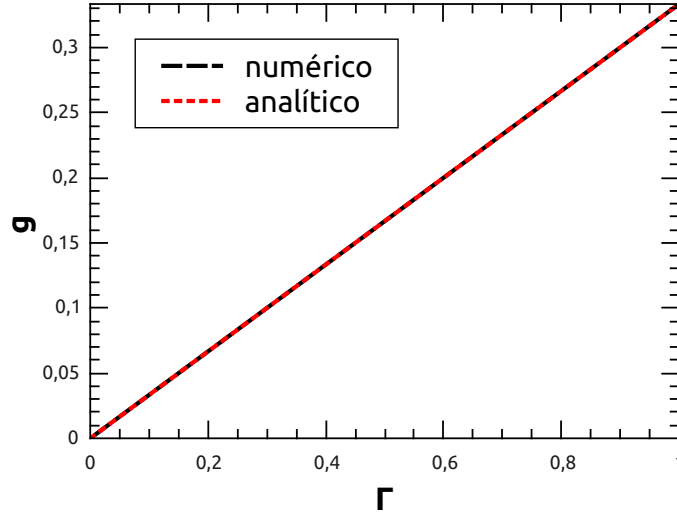


Figura 4.2: Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ para dois pontos quânticos simétricos conectados em série ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma_3$). A linha pontilhada em vermelho é a curva teórica e a linha pontilhada em preto foi plotada com os dados numéricos do método de Newton.

dução obtidos pelo método de Newton (linha pontilhada em preto) para dois pontos quânticos simétricos em série. A curva teórica, linha pontilhada em vermelho, foi determinada a partir da equação

$$g = \frac{\Gamma}{3} \quad (4.20)$$

obtida para o caso particular $L = 2$ da eq. (3.12) para uma cadeia de L pontos quânticos simétricos. A eq. (4.20) também pode ser obtida via lei de Ohm, ou seja, o inverso da condutância total adimensional e intensiva é a soma do inverso da condutância adimensional e intensiva de cada conector:

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} &= \frac{1}{\Gamma_1} + \frac{1}{\Gamma_2} + \frac{1}{\Gamma_3} \\ g &= \frac{\Gamma_1 \Gamma_2 \Gamma_3}{\Gamma_1 \Gamma_2 + \Gamma_2 \Gamma_3 + \Gamma_1 \Gamma_3}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Substituindo $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma_3 = \Gamma$ em (4.21), chegamos à eq. (4.20):

$$g = \frac{\Gamma^3}{3\Gamma^2} = \frac{\Gamma}{3}.$$

Da figura (4.2) é possível notar que a condutância dos pontos quânticos em série é zero quando os contatos são totalmente fechados ($\Gamma = 0$), pois neste caso não há corrente elétrica

através das cavidades e, portanto, não há condutância. Porém quando os contatos têm transparências não nulas, há um fluxo de elétrons através das cavidades e a condutância torna-se diferente de zero. No caso em que os contatos são ideais ($\Gamma = 1$), a condutância dos pontos quânticos é $g = \frac{1}{3}$ que é o valor de g esperado para três contatos abertos e simétricos em série.

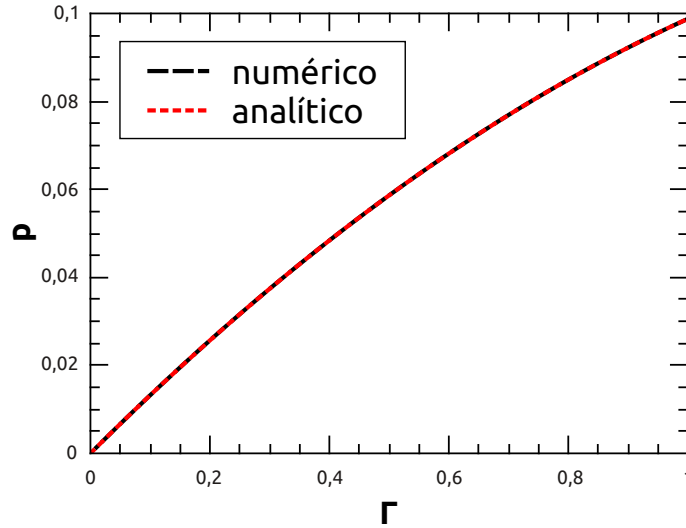


Figura 4.3: Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função da transparência Γ para dois pontos quânticos simétricos conectados em série ($\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma_3$). A linha pontilhada em vermelho é a curva teórica e a linha pontilhada em preto foi plotada com os dados numéricos obtidos pelo método de Newton.

Na figura (4.3) são apresentados os resultados da potência do ruído de disparo para dois pontos quânticos simétricos. A linha tracejada em vermelho é o resultado teórico e a linha tracejada em preto é o resultado numérico encontrado através do método de Newton. A curva teórica foi construída a partir da equação

$$p = \frac{1}{27} \left[\frac{11}{3} \Gamma - \Gamma^2 \right] \quad (4.22)$$

obtida para o caso particular ($L = 2$) da eq. (3.14) para uma cadeia de L pontos quânticos simétricos.

Podemos ver que a potência do ruído de disparo de dois pontos quânticos em série, mostrada na figura (4.3), é zero para contatos completamente fechados ($\Gamma = 0$) pois neste caso não há corrente elétrica atravessando as cavidades e por isso não pode haver flutuações de corrente. No entanto, quando os contatos são ideais ($\Gamma = 1$) as cavidades são abertas e também simétricas devido aos contatos terem a mesma transparência. Neste caso a potência do ruído de disparo esperada, de acordo com a ref. [25], quando o ruído é devido somente às cavidades, é dada por

$$p = g \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{3M^2} \right) \quad (4.23)$$

onde M é o número de contatos em série. Substituindo $g = 1/3$ e $M = 3$ em (4.23), a potência do ruído de disparo é $p = 8/81 \approx 0,099$ que é o resultado da figura (4.3) quando $\Gamma = 1$.

Discutiremos agora os resultados para dois pontos quânticos assimétricos em série. A

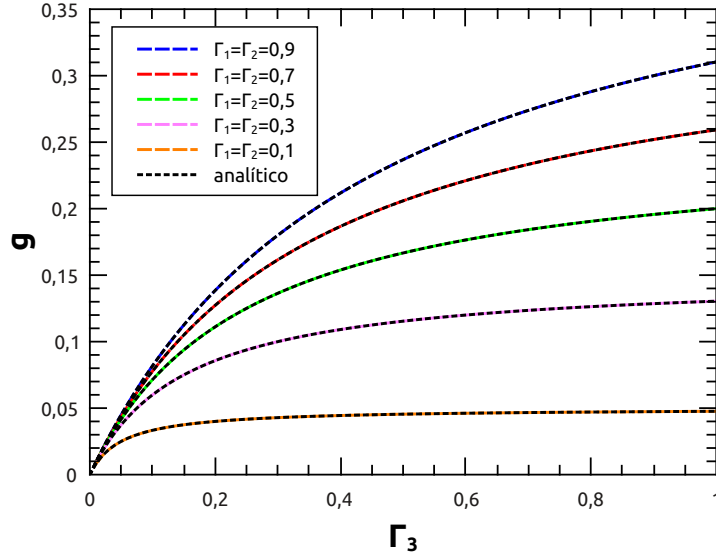


Figura 4.4: Condutância adimensional e intensiva em função da transparência Γ_3 para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde a diferentes valores fixos de $\Gamma_1 = \Gamma_2$ (ver a legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.

figura (4.4) apresenta os resultados numéricos e analíticos de $g \times \Gamma_3$ para dois pontos quânticos assimétricos em série. A curva teórica foi determinada através da eq. (4.21) para a condutância ôhmica de três contatos em série. Podemos observar da figura (4.4) que se as cavidades são assimétricas ($\Gamma_3 \neq \Gamma_1 = \Gamma_2$) a condutância é suprimida e à medida que esta assimetria aumenta a supressão torna-se maior. Se as transparências $\Gamma_1 = \Gamma_2$ são nulas, de modo que as cavidades são altamente assimétricas, a condutância será zero independentemente de Γ_3 pois neste caso não há corrente elétrica.

Na figura (4.5) são apresentados os resultados analíticos e numéricos de $p \times \Gamma_3$ para dois pontos quânticos assimétricos em série. A curva teórica foi determinada a partir da seguinte expressão [26]:

$$p = \frac{g}{3} \left[\frac{1 + [(2 - 3\Gamma_2)\Gamma_1^3\Gamma_3^3 + \Gamma_2^3(\Gamma_1^3(2 - 3\Gamma_3) + 2\Gamma_3^3 - 3\Gamma_1\Gamma_3^3)]}{[\Gamma_1\Gamma_3 + \Gamma_2(\Gamma_1 + \Gamma_3)]^3} \right], \quad (4.24)$$

onde a condutância g é dada por

$$g = \frac{\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3}{\Gamma_1\Gamma_2 + \Gamma_2\Gamma_3 + \Gamma_1\Gamma_3}.$$

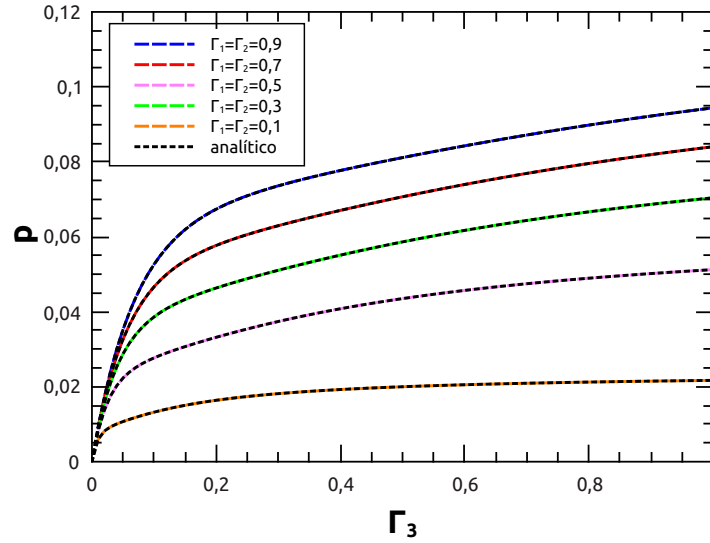


Figura 4.5: Potência do ruído de disparo adimensional e intensiva em função de Γ_3 para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde a diferentes valores fixos de $\Gamma_1 = \Gamma_2$ (ver a legenda do gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.

A potência do ruído de disparo na figura (4.5) também é suprimida quando uma das cavidades é assimétrica ($\Gamma_3 \neq \Gamma_1 = \Gamma_2$) e quanto maior a assimetria (quanto mais as transparências dos contatos $\Gamma_1 = \Gamma_2$ diminuem) maior a supressão de p .

Apresentamos a seguir os resultados para pontos quânticos assimétricos com apenas Γ_1 fixo e Γ variando (onde $\Gamma = \Gamma_2 = \Gamma_3$).

Na figura (4.6) são apresentados os resultados de $g \times \Gamma$ para dois pontos quânticos assimétricos. Podemos observar que assim como a condutância da figura (4.4) é suprimida para pontos quânticos assimétricos, a condutância na figura (4.6) também é suprimida para cavidades assimétricas. Porém nesta última a supressão é menor, pois apenas um contato tem transparência fixa (transparência Γ_1) e por isto a condutância tem supressão menor quando a transparência deste contato diminui. Mesmo assim se a transparência Γ_1 for nula, a condutância g será zero para quaisquer valores de $\Gamma_2 = \Gamma_3$.

Por último são apresentados na figura (4.7) os resultados analíticos e numéricos de $p \times \Gamma$ para dois pontos quânticos assimétricos com Γ_1 fixo e Γ variando ($\Gamma = \Gamma_2 = \Gamma_3$). A curva teórica também foi determinada a partir da eq. (4.24). Da figura (4.7) vemos que a potência do ruído de disparo também sofre uma supressão quando as cavidades são assimétricas ($\Gamma_1 \neq \Gamma_2 = \Gamma_3$), mas esta supressão é menor se comparada à da figura (4.5) quando $\Gamma_1 = \Gamma_2$ são fixos.

Observando as figuras (4.5) a (4.7) podemos ver que os resultados numéricos da condutância e da potência do ruído de disparo, tanto em cavidades simétricas quanto assimétricas, estão em plena concordância com seus respectivos resultados teóricos. Portanto, o método de

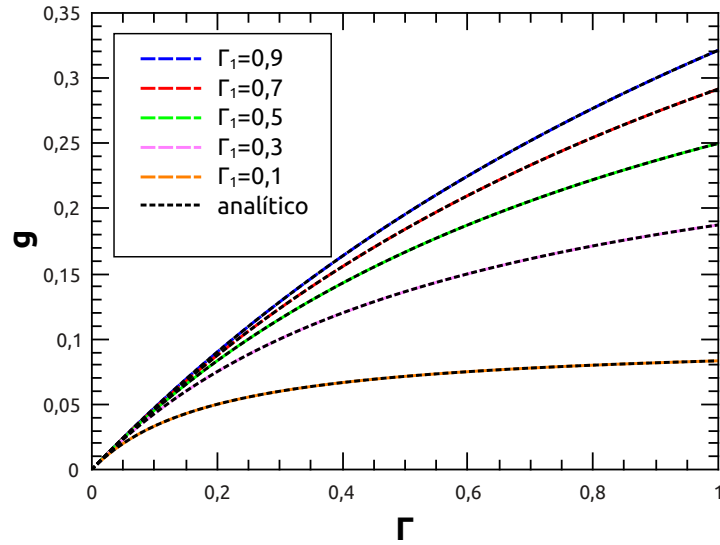


Figura 4.6: Condutância em função da transparência Γ ($\Gamma = \Gamma_2 = \Gamma_3$) para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde aos valores fixos de Γ_1 (ver a legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.

Newton mostrou-se bastante preciso ao obter estes observáveis de transporte para dois pontos quânticos em série.

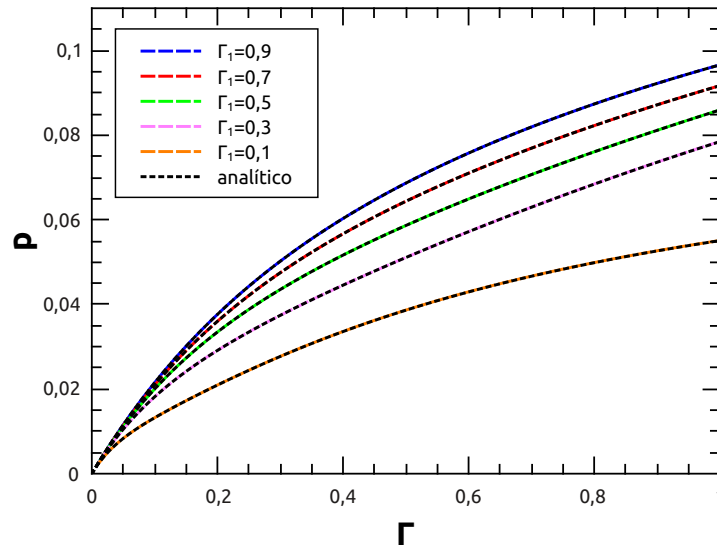


Figura 4.7: Potência do ruído de disparo em função de Γ ($\Gamma = \Gamma_2 = \Gamma_3$) para dois pontos quânticos assimétricos em série. Cada curva corresponde aos valores fixos de Γ_1 (ver legenda no gráfico). A linha tracejada em preto é a curva teórica e as linhas tracejadas em cores são as curvas numéricas obtidas pelo método de Newton.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

O estudo numérico da teoria quântica de circuitos foi proposto neste trabalho a fim de obter a condutância e a potência de ruído de disparo em pontos quânticos. Primeiramente implementamos o método da bisseção em Fortran para o caso de um único ponto quântico, depois implementamos o método de Newton com o objetivo de resolver o sistema não-linear resultante de dois pontos quânticos conectados em série. Em ambos os casos obtivemos a condutância e a potência do ruído de disparo de pontos quânticos simétricos e assimétricos.

No caso de um ponto quântico simétrico, em que usamos o método da bisseção, ao comparar a condutância e a potência do ruído de disparo com seus respectivos resultados analíticos, concluímos que os resultados numéricos estão em plena concordância com os resultados encontrados na literatura [7]. Dessa forma, o método da bisseção mostrou-se bastante preciso ao obter a condutância e a potência do ruído de disparo em um ponto quântico simétrico. Ainda usamos o método da bisseção para encontrar a condutância e a potência do ruído de disparo em um ponto quântico assimétrico, que também obteve pleno acordo com os resultados analíticos encontrados na literatura [24].

Apesar do método da bisseção ter se mostrado bastante eficiente para um ponto quântico, seria inviável implementá-lo para dois pontos quânticos pois neste caso devemos resolver um sistema de equações não-lineares e o mais adequado é usar o método de Newton. Assim, implementamos o método de Newton em Fortran e encontramos a condutância e a potência do ruído de disparo de dois pontos quânticos em série. Comparando os resultados obtidos numericamente (para pontos quânticos simétricos) com os respectivos resultados analíticos, também concluímos que os resultados numéricos são praticamente idênticos aos encontrados na literatura [7]. Logo, o método de Newton também mostrou-se bastante preciso para o caso de dois pontos quânticos em série. Foram obtidos ainda, através do método de Newton, a condutância e a potência do ruído de disparo de pontos quânticos assimétricos em série que também estão em ótimo acordo com os resultados analíticos.

Como possíveis extensões deste trabalho podemos calcular a condutância de Andreev em que temos um circuito constituído por reservatórios normais e supercondutores. Também é possível implementar o método numérico de Newton para circuitos mais complexos como uma

cadeia linear de pontos quânticos. Neste caso, quanto maior o número de pontos quânticos em série maior o sistema não-linear a ser resolvido. Por exemplo, no caso de dois pontos quânticos que tratamos no capítulo 4 o sistema não-linear tem dimensões 2×2 . Mas se em vez disso tivermos três pontos quânticos em série, o sistema não-linear terá dimensões 3×3 e assim sucessivamente até que para L pontos quânticos devemos resolver um sistema não-linear de dimensões $L \times L$. Pela dificuldade em se resolver analiticamente sistemas não-lineares de altas ordens, o método numérico de Newton tem boas perspectivas na abordagem de tais problemas. Também como perspectivas de trabalhos futuros podemos estruturar o algoritmo para calcular funções simétricas dos autovalores de transmissão e buscar novos observáveis como entropia de Von Neumann e concorrência.

Referências Bibliográficas

- [1] S. DATTA. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge University Press, 1997.
- [2] Y. IMRY. Introduction to Mesoscopic Physics. Oxford University Press, 1997.
- [3] B. J. VAN WEES, et. al. Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron gas. Phys. Rev. Lett., vol. 60, p. 848-850, 1988.
- [4] G. C. DUARTE FILHO. Estatística de contagem de carga e Teoria Quântica de Circuitos em Sistemas Híbridos Metal Normal-supercondutor e Em Cadeia de Pontos Quânticos. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Pernambuco, Fevereiro de 2010.
- [5] H. S. BORBA. Teoria de Circuitos para a Estatística de Contagem de Carga. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco, agosto de 2005
- [6] Y. V. NAZAROV; Y. M. BLANTER. Quantum Transport: introduction to nanoscience. Cambridge University Press, New York, 2009
- [7] F. A. G. ALMEIDA. Algoritmos Numéricos de Matrizes Aleatórias Aplicados a Sistemas Mesoscópicos. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Pernambuco, Fevereiro de 2010.
- [8] D. A. WHARAM, T. J. THORNTON, et. al. One-Dimensional Transport and the Quantization of the Ballistic Resistance. J. Phys. C 21, 1988.
- [9] Y. ALHASSID. The Statistical Theory of Quantum Dots. Rev. Mod. Phys. 72:895, 2000.
- [10] R. LANDAUER. Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction. IBM J. Res. Develop, vol. 1, p. 233, 1957.
- [11] R. LANDAUER. Electrical Resistance of Disordered One-dimensional Lattices. Phil. Mag., vol. 21, p. 863, 1970.
- [12] M. BÜTTIKER. Four-terminal Phase Coherent Conduance. Phys. Rev. Lett., vol. 57, p. 1761, 1986.

- [13] M. BÜTTIKER. Scattering Theory of Thermal and Excess Noise in Open Conductors. Phys. Rev. Lett., vol. 65, p.2901, 1990.
- [14] T. MARTIN. Noise in Mesoscopic Physics. Elsevier, New York, 2005.
- [15] M. J. M. de JONG and C. W. J. BEENAKKER. Shot Noise in Mesoscopic Systems. University of Leiden, The Netherlands, 1997.
- [16] C. W. J. BEENAKKER and M. BÜTTIKER. Suppression of Shot Noise in Metallic Diffusive Conductors. Phys. Rev. B, vol. 46, p. 1889, 1992.
- [17] Y. M. BLANTER and M. BÜTTIKER. Shot Noise in Mesoscopic Conductors. Phys. Rep., vol. 336, p. 1, 2000.
- [18] M. VANEVIĆ; W. BELZIG. Full Counting Statistics of Andreev Scattering in an Asymmetric Chaotic Cavity. Phys. Rev. B., vol. 72, p. 134522, 2005.
- [19] Y. V. NAZAROV; D. A. BAGRETS. Circuit Theory for Full counting statistics in Multiterminal circuits. Phys. Rev. Lett., vol. 88, p. 196801, 2002.
- [20] G. CAMPAGNANO and Y. V. NAZAROV. G_Q -Corrections in Circuit Theory of Quantum Transport. Phys. Rev. B 74, 125307, 2006.
- [21] R. L. BURDEN; J. D. FIRES. Análise Numérica. Pioneira Thomson Learning, São Paulo, 2003.
- [22] M. A. GOMES RUGGIERO; V. L. ROCHA LOPES. Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais. Pearson Makron Books, São Paulo, 1996.
- [23] L. C. BARROSO, et. al. Cálculo Numérico Com Aplicações. Harbra, São Paulo, 1987.
- [24] J. G. G S. RAMOS, A. L. R. BARBOSA and A. M. S. MACÊDO. Quantum Interference Correction to the Shot-Noise Power in Nonideal Chaotic Cavities. Phys. Rev. B, vol. 78, p. 235305, 2008.
- [25] S. OBERHOLZER, et. al. Shot Noise of Series Quantum Point Contacts Intercalating Chaotic Cavities. Phys. Rev. B 66, 233304, 2002
- [26] Fornecido pelo professor Gerson Cortês Duarte Filho do Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe em junho de 2015. Email: gersonov@gmail.com
- [27] A. L. R. BARBOSA. Análise Diagramática para Cavidades Caóticas de Barreira Dupla: Equivalência com Teoria Quântica de Circuitos. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco, Abril de 2005.
- [28] C. W. J. BEENAKKER. Random-matrix Theory of Quantum Transport. Rev. Mod. Phys. 69:731, 1997.